

Национальная академия наук Украины
Институт кибернетики имени В.М. Глушкова

На правах рукописи

Стецюк Петр Иванович

УДК 519.8

АЛГОРИТМЫ НЕДИФФЕРЕНЦИРУЕМОЙ ОПТИМИЗАЦИИ
И ЛАГРАНЖЕВЫЕ ДВОЙСТВЕННЫЕ ОЦЕНКИ
В СЛОЖНЫХ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ

01.05.01 – теоретические основы информатики и кибернетики

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант
доктор физ.-мат. наук,
профессор,
академик НАН Украины

Сергиенко И.В.

Киев – 2013

Оглавление

Введение	4
1 Три центральные научные идеи Н.З. Шора	16
1.1 Субградиентный метод	17
1.2 Субградиентные методы с растяжением пространства	23
1.3 Двойственные оценки в экстремальных квадратичных задачах	33
1.4 Заключение к разделу 1	41
2 Модификации метода эллипсоидов	43
2.1 Приближенный метод эллипсоидов	43
2.2 Метод нахождения L_p -решения системы линейных уравнений	56
2.3 Ускоренный метод эллипсоидов	62
2.4 Методы простых эллипсоидов	68
2.5 Основные результаты раздела 2	76
3 Субградиентные методы минимизации овражных функций	78
3.1 Субградиентный метод Поляка и проблема овражности	79
3.2 Ускоренные модификации субградиентного метода Поляка	86
3.3 Метод нахождения допустимой точки выпуклого неравенства	94
3.4 Три метода решения системы линейных уравнений	101
3.5 Линейные операторы в квазиньютоновских методах	107
3.6 Основные результаты раздела 3	114
4 Алгоритмы уточнения двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах	116
4.1 Уточнение оценок в бинарных и булевых квадратичных задачах	117
4.2 Нечетное количество ± 1 и бинарный квадратичный многогранник	125
4.3 Новые двойственные оценки для числа устойчивости графа	137
4.4 Задача о максимальном взвешенном разрезе графа	145
4.5 Основные результаты раздела 4	157

5	ЛП-ориентированные оценки для взвешенного числа устойчивости графа	159
5.1	О новых свойствах оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа	159
5.2	ЛП-ориентированные верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа	171
5.3	ЛП-оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ и t -совершенные графы	185
5.4	ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ и t -совершенные графы	194
5.5	Основные результаты раздела 5	201
6	Три квадратичные экстремальные задачи	204
6.1	Задача о бисекции графа	205
6.2	Специальная квадратичная задача на многообразии Штифеля .	215
6.3	Оптимальные нормированные векторы конечного продукта и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева . . .	228
6.4	Основные результаты раздела 6	235
7	Прикладные экстремальные задачи	238
7.1	Задачи нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети	239
7.2	Задачи оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий	256
7.3	Задачи загрузки энергосистемы с учетом экологических факторов и маневренности нагрузками энергоблоков	266
7.4	Негладкий штраф и субградиентные методы для решения задачи проекции на политоп	273
7.5	Основные результаты раздела 7	280
	Выводы	282
	Литература	285

Введение

Актуальность темы. К минимизации выпуклых функций с разрывным градиентом сводится большое количество проблем, возникающих при решении сложных задач математического программирования. Владение методами недифференцируемой (негладкой) оптимизации дает возможность гибко использовать схемы декомпозиции с учетом специфики задач большой размерности, позволяет получать двойственные оценки для задач дискретного и непрерывно-дискретного программирования, для некоторых классов многоэкстремальных задач. Появляется возможность использовать негладкие функции штрафа, которые позволяют при конечных значениях штрафных параметров получать задачу безусловной минимизации, эквивалентную начальной задаче выпуклого программирования. Техничко-экономические характеристики объектов, подлежащих оптимизации, обычно хорошо аппроксимируются кусочно-гладкими функциями, и это также приводит к постановкам задач оптимизации с негладкими функциями. Отсутствие эффективных методов негладкой оптимизации затрудняло решение указанных классов задач и заставляло или изменять формулировку задачи, что ухудшало соответствие модели реальности, или использовать различные приемы сглаживания функций. Последнее не всегда приводит к успеху, так как применение сглаживания ухудшает обусловленность задачи и снижает вычислительную устойчивость даже таких эффективных методов гладкой минимизации, как квазиньютоновские и методы сопряженных градиентов.

Следовательно, область применения методов негладкой оптимизации является достаточно широкой и разработке вычислительных методов минимизации негладких функций следует уделять большое внимание. С прикладной точки зрения нет резкой границы между негладкими и гладкими функциями. Гладкая функция с очень быстро изменяющимся градиентом близка по своим свойствам к негладкой функции. Поэтому вычислительные методы, разработанные для решения задач негладкой оптимизации, оказываются эффективными и для оптимизации овражных гладких функций.

В Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины под руководством академика Н.З. Шора разработаны семейства алгоритмов негладкой оптимизации: методы обобщенного градиентного спуска (субградиентные методы); субградиентные методы с растяжением пространства в направлении субградиента (по сравнению с субградиентными методами они имеют ускоренную сходимость, мировое признание получил их частный случай – метод эллипсоидов); субградиентные методы с растяжением пространства в направлении разности двух последовательных субградиентов, которые получили название r -алгоритмов. По надежности, времени счета и точности результатов r -алгоритмы оказались конкурентоспособными с наиболее эффективными методами решения гладких, но плохо обусловленных задач.

r -Алгоритмы позволили решать задачи выпуклого программирования большой размерности с использованием схем декомпозиции, минимаксные и матричные задачи негладкой оптимизации и другие. Однако теоретическое обоснование их сходимости является недостаточным. В одной из работ Н.З. Шор и В.И. Гершович написали: „Теория всего класса алгоритмов с растяжением пространства далека от совершенства. Нам кажется достаточно реалистичной целью построение такого алгоритма, который по своей практической эффективности не уступал бы r -алгоритму и был столь же хорошо обоснован, как метод эллипсоидов“. И хотя с тех пор прошло более тридцати лет, это замечание не утратило своей актуальности.

Особым источником задач негладкой оптимизации является использование лагранжевых двойственных оценок целевой функции в невыпуклых квадратичных моделях. Такие модели встречаются во многих практических приложениях, к ним сводятся задачи оптимизации с полиномиальными функциями, важные классы NP-сложных комбинаторных задач и экстремальных задач из теории графов. Среди последних следует отметить задачи нахождения максимального взвешенного независимого множества вершин графа, максимального разреза графа, оптимальной бисекции графа, оптимального разбиения графа на k частей с фиксированным числом вершин в каждой части и т.д.

Начало исследования таких задач под руководством Н.З. Шора пришлось на 1985 год. Позже это направление исследований получило название техники лагранжевых двойственных оценок для многоэкстремальных квадратичных задач. Центральным моментом в этой технике является то, что лагранжевы оценки можно улучшать, добавляя в модель так называемые функционально избыточные квадратичные ограничения. Алгоритмы нахождения лагранжевых двойственных оценок являются альтернативой использованию методов внутренних точек для решения задач полуопределенного программирования (semidefinite programming), которые характеризуются условием неотрицательной определенности некоторой симметричной матрицы. Многие задачи полуопределенного программирования целесообразно рассматривать как частный случай задач недифференцируемой оптимизации. Действительно, если элементы симметричной $n \times n$ -матрицы $X(u)$ являются линейными функциями от вектора неизвестных параметров $u \in R^m$, то условие неотрицательной определенности матрицы $X(u)$ эквивалентно выпуклому негладкому ограничению $\varphi(u) = -\lambda_n(X(u)) \leq 0$, где $\lambda_n(X(u))$ – минимальное собственное число матрицы $X(u)$.

Лагранжевы двойственные оценки играют важную роль для NP-сложных задач, так как позволяют выделить такие их подклассы, которые можно решить за полиномиальное время. Чрезвычайно интересными оказались результаты, полученные Н.З. Шором для NP-сложной задачи нахождения взвешенного числа устойчивости (независимости) графа. Эта задача является одной из центральных в теории информации и кодирования, проектирования различных устройств при определенных условиях несовместности. Она тесно связана с известными задачами выбора, разбиения множеств, раскраски графов и другими комбинаторными задачами, которые имеют много приложений. Двойственные оценки Шора для указанной задачи тесно связаны с известными числами Ловаса $\theta(G, w)$ и $\theta'(G, w)$, которые имеют важное значение при обосновании результатов о полиномиальной разрешимости ряда задач в теории графов.

Следовательно, развитие методов минимизации негладких выпуклых функций и техники лагранжевых двойственных оценок является актуальным. Оно связано с многочисленными приложениями обоих подходов при решении сложных задач оптимизации. Эти подходы являются взаимосвязанными, так как задачи нахождения лагранжевых оценок, как правило, сводятся к минимизации негладких выпуклых функций.

Связь работы с научными программами, планами, темами. Работа выполнялась в соответствии с планами научных исследований отдела № 120 Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины в рамках научных тем, в которых автор был руководителем или ответственным исполнителем: „Разработка новых методов решения сложных дискретных и многоэкстремальных задач оптимизации и их применение“ (номер госрегистрации 0102U003213, 2002-2006), „Разработка и обоснование новых эффективных численных методов решения сложных задач оптимизации“ (номер госрегистрации 0104U000276, 2004-2007), „Разработать математические и программные средства решения некоторых классов структурированных задач оптимизации“ (номер госрегистрации 0108U000280, 2008-2012).

Цель и задачи исследования. Целью диссертационной работы является развитие теории и методов негладкой оптимизации, которое связано с решением следующих задач: (1) разработка и теоретическое обоснование субградиентных алгоритмов минимизации негладких выпуклых функций, основанных на использовании линейных неортогональных преобразований пространства; (2) разработка и теоретическое исследование различного рода функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах, изучение их влияния на уточнение двойственных оценок целевой функции в квадратичных булевых и бинарных задачах; (3) программная реализация, экспериментальное исследование субградиентных алгоритмов для задач математического программирования и алгоритмов нахождения лагранжевых двойственных оценок для квадратичных экстремальных задач; (4) апробация разработанных методов для нахождения оптимальных параметров различно-

го рода систем (экономических, транспортных, энергетических и других).

Объектом исследования являются задачи негладкой оптимизации, многоэкстремальные квадратичные задачи, экстремальные задачи на графах.

Предметом исследования являются методы поиска минимума негладких овражно функций и алгоритмы уточнения двойственных оценок в булевых и бинарных квадратичных задачах.

Методы исследования включают выпуклый анализ и теорию двойственности, линейные неортогональные преобразования пространства, эллипсоидальную и полиэдральную аппроксимации, вычислительный эксперимент.

Научная новизна полученных результатов. В результате исследования получены такие результаты.

1. Разработан приближенный и ускоренный методы эллипсоидов – новые модификации метода эллипсоидов. Обоснована их сходимость со скоростью геометрической прогрессии, в которой знаменатель зависит только от размерности пространства. Исследована связь разработанных модификаций с методом эллипсоидов Юдина-Немировского-Шора.
2. Разработаны и обоснованы два новых субградиентных метода с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. Они используют шаг Поляка в преобразованном пространстве переменных и характеризуются монотонным уменьшением расстояния до точки минимума в последовательно преобразованных пространствах.
3. Предложены три новых способа для построения функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах с булевыми и бинарными переменными. Первые два способа генерируют квадратичные равенства, соответствующие введению новых переменных в форме произведения уже существующих переменных. Третий способ для бинарных переменных генерирует квадратичные неравенства, которые являются следствием того, что квадрат суммы нечетного количества ± 1 не меньше единицы.

4. На основе предложенных способов получены уточненные лагранжевые двойственные оценки для числа устойчивости графа, взвешенного числа устойчивости графа, для взвешенного максимального разреза графа, для задачи максимизации квадратичной функции с бинарными или булевыми переменными. На основе третьего способа построена полиэдральная аппроксимация сверху бинарного квадратичного многогранника, которая при двух, трех и четырех переменных является точной.
5. Найдены новые свойства оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа. Они связаны с таким подграфом, как p -колесо, и на его основе построено новое семейство графов – W_p -совершенные графы. Для них наилучшая из оценок Шора является точной, и взвешенное число устойчивости графа может быть найдено за полиномиальное время.

Практическое значение полученных результатов. Разработанные методы и алгоритмы можно применять при решении сложных проблем оптимизации. В работе на их основе получены следующие результаты.

1. Разработан алгоритм нахождения L_p -решения переопределенной системы линейных уравнений при двусторонних ограничениях на компоненты решения; алгоритм нахождения допустимой точки выпуклого неравенства в шаре начальной локализации; три итерационных метода нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений.
2. Разработан и программно реализован итерационный алгоритм нахождения верхней оценки для взвешенного числа устойчивости графа, в котором многогранник устойчивых множеств аппроксимируется задачей линейного программирования с поэтапным дополнением ее конечным числом ограничений, соответствующих нарушенным линейным неравенствам для нечетных циклов и p -колес. Алгоритм проверен для графов, содержащих до нескольких тысяч вершин.
3. Разработаны математические модели, методы и программное обеспечение для таких задач: задача о максимальном разрезе взвешенного графа с

заданными количествами вершин в подмножествах разбиения; задача нахождения глобального минимума квадратичной функции на многообразии Штифеля; задача нахождения оптимальных нормированных структур конечного выпуска и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева; задачи нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети с передачей потоков по произвольным допустимым путям и с передачей потоков по заданном множестве допустимых путей; задачи нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий; задачи нахождения нагрузок в энергосистеме с учетом степени маневренности отдельных семейств энергоблоков.

Личный вклад соискателя. Все научные результаты диссертационной работы получены лично или при участии автора. Шестнадцать работ опубликовано без соавторов [65, 66, 67, 69, 76, 77, 82, 83, 114, 94, 115, 71, 92, 90, 103, 112]. В коллективных монографиях диссертанту принадлежат: в [26] – разделы 1.4 и 4.1, в [33] – раздел 3, в [118] – разделы 1, 2 и 3. В работах, написанных в соавторстве, диссертанту принадлежит: в [74] – разработка и обоснование алгоритма, в [78] – разработка и обоснование стартовых условий для метода, в [145] – разработка квадратичных моделей, в [79, 81] – разработка математических моделей и аналитического способа вычисления градиентов, в [84, 85, 86, 98, 102] – формулировка квадратичных задач и их релаксированных аналогов, в [88, 91, 95] – формулировка задач и теоретическое обоснование алгоритмов, в [96] – постановка математических моделей, в [55] – формулировки квадратичных задач и доказательство теоремы 2, в [99] – формулировка негладкой задачи и доказательство теоремы, в [101, 100, 109, 108] – формулировка квадратичной задачи и доказательства теорем для продуктивной матрицы Леонтьева, анализ результатов тестовых экспериментов, в [56] – описание методов и алгоритмов для трех идей Шора, в [200] – описание вычислительных экспериментов.

Апробация результатов диссертации. Основные идеи, принципы, положения и результаты исследований прошли апробацию на профильных се-

минарах Института кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины и докладывались на конференциях, среди которых: „Recent Advances in Non-Differentiable Optimization“ (Киев, 2000, 2001), XII Байкальская международная конференция (Иркутск, Россия, 2001), „Вопросы оптимизации вычислений“ (Кацевели, 2001, 2007, 2009, 2011), Международная конференция, посвященная 65-летию со дня рождения Б.М. Пшеничного (Киев, 2002), „Теория принятия решений“ (Ужгород, 2002, 2004, 2008), "Математическое программирование и приложения"(Екатеринбург, Россия, 2003, 2011), 11-я Международная конференция по автоматическому управлению (Киев, 2004), „Systems Analysis, Data Mining and Optimization in Biomedicine“ (Gainesville, USA, 2005), International Conference in Honor of the 70th Birthday of Academician I.V. Sergienko „Applied Optimization and Metaheuristic Innovations“ (Ялта, 2006), „Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии“ (Кишинэу, Молдова, 2008, 2010, 2012), „Discrete and Global Optimization“ (Ялта, 2008), Международная конференция „50 лет Институту кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины“ (Киев, 2008), „Дискретная оптимизация и исследование операций“ (Новосибирск, Россия, 2010), Крымская осенняя математическая школа (КРОМШ) (Севастополь, 2010, 2011, 2012), „Математические методы, модели и информационные технологии в экономике“ (Черновцы, 2011), Международная конференция, посвященная 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко „Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика“ (Новосибирск, Россия, 2011), II International Conference "Optimization and Applications (OPTIMA-2011)"(Petrovac, Montenegro, 2011), „Статистика, моделирование, оптимизация“ (Челябинск, Россия, 2011), 10th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization (Siauliai, Lithuania, 2012), 25th European Conference on Operational Reserch (Vilnius, Lithuania, 2012).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в трех монографиях [26, 33, 118], 30 статьях фаховых изданий согласно „Переліку фахових видань України“ [65, 66, 67, 69, 76, 77, 82, 83, 114, 74, 78, 145, 79, 81,

84, 85, 86, 98, 102, 88, 91, 95, 96, 55, 99, 101, 100, 109, 108, 56], трех статьях других изданий [200, 94, 115] и семи статьях в материалах международных конференций [71, 92, 90, 206, 103, 112, 57].

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, семи разделов, заключения и списка использованной литературы (210 наименований). Общий объем работы составляет 305 страниц, основной текст работы изложен на 275 страницах (не включены стр. 1, 2, 3, 85, 203, 237, 251, 252, 254). Работа содержит 19 рисунков и 16 таблиц (без приложения).

Первый раздел посвящен обзору трех центральных идей Н.З. Шора в негладкой оптимизации: обобщенный градиентный спуск (1962 г.), использование линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций (1969 г.), двойственный подход к получению и уточнению оценок целевой функции в невыпуклых квадратичных моделях (1985 г.). Описаны применения этих идей в методах и алгоритмах, разработанных в Институте кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, и отмечена связь диссертационной работы с развитием идей Шора (1969 и 1985).

Во втором разделе диссертации описаны новые модификации метода эллипсоидов – приближенный и ускоренный методы эллипсоидов (подразделы 2.1 и 2.3). Обоснована их сходимость со скоростью геометрической прогрессии, в которой знаменатель зависит только от размерности пространства, и исследована их связь с методом эллипсоидов Юдина – Немировского – Шора. На основе приближенного метода эллипсоидов в подразделе 2.2 построен алгоритм нахождения L_p -решения переопределенной системы линейных уравнений при двусторонних ограничениях на компоненты решения. В подразделе 2.4 описаны итерационные процессы, использующие эллипсоиды, которые содержат пересечение шара и гиперплоскости. Их „предельные“ варианты находят решение специальных задач не более чем за n итераций, где n – размерность пространства переменных.

Третий раздел посвящен исследованиям субградиентных методов минимизации овражных негладких выпуклых функций. В подразделе 3.1 описан

субградиентный метод Поляка для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном ее минимальном значении. Анализируются способы его ускорения для овражных функций. В подразделе 3.2 описаны два новых субградиентных метода с преобразованием пространства, которые используют шаг Поляка (известен еще как шаг Агмона – Моцкина – Шенберга) и преобразуют пространство переменных с помощью однорангового линейного оператора. В подразделе 3.3 описан метод фейеровского типа с преобразованием пространства для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства, а в подразделе 3.4 на его основе построены три итерационных метода для решения системы линейных алгебраических уравнений. В подразделе 3.5 приведены линейные операторы преобразования пространства для двух квазиньютоновских методов: Давидона – Флетчера – Пауэлла и Бройдена – Флетчера – Шенно и анализируется их связь с r -алгоритмами.

В четвертом разделе описаны три способа построения функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах с булевыми и бинарными переменными и уточненные на их основе двойственные оценки для ряда экстремальных задач. В подразделе 4.1 описаны два способа построения квадратичных равенств. С их помощью для задач максимизации квадратичной функции с бинарными или булевыми переменными построены квадратичные экстремальные задачи, которые индуцируют более точные верхние оценки. В подразделе 4.2 описан третий способ для бинарных переменных. На его основе построена полиэдральная аппроксимация сверху для бинарного квадратичного многогранника, которая для двух, трех и четырех переменных является точной. В подразделе 4.3 построены новые верхние оценки для числа устойчивости (независимости) графа, которые улучшают самую точную из предложенных Н.З. Шором верхних оценок. В подразделе 4.4 построены новые квадратичные модели для взвешенного максимального разреза графа, для которых соответствующие верхние оценки оказываются не хуже, чем лучшая из двух оценок – Барахоны-Маджуба (1986 г.) и Шора – Березовского (1995 г.).

В пятом разделе обсуждаются оценки сверху для взвешенного числа устойчивости графа: простая и улучшенная оценки Шора, ряд верхних оценок на основе решения различных задач линейного программирования (ЛП-ориентированные оценки). В подразделе 5.1 описаны новые свойства улучшенной оценки Шора и обсуждаются семейства графов, для которых взвешенное число устойчивости можно найти за полиномиальное время. В подразделе 5.2 описаны алгоритмы нахождения ЛП-ориентированных оценок, которые базируются на аппроксимации многогранника устойчивых множеств с помощью линейных неравенств для нечетных циклов и p -колес в графе. Приведены результаты тестовых экспериментов на графах, содержащих от нескольких сотен до нескольких тысяч вершин. В подразделах 5.3 и 5.4 построены две новые верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа. Они определяются решением задач линейного программирования с количеством ограничений, которое кубически зависит от числа вершин в графе. Показано, что обе оценки являются точными для t -совершенного графа.

Шестой раздел посвящен специальным квадратичным экстремальным задачам и методам их решения на основе техники лагранжевых двойственных оценок. Особенностью этих задач является то, что целевая функция и ограничения являются однородными квадратичными функциями, т.е. такими, которые не содержат линейных членов. В подразделе 6.1 рассмотрена задача нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения вершин графа. Для нее исследован алгоритм получения лагранжевой двойственной оценки. В подразделе 6.2 рассматривается задача глобальной оптимизации, связанная с нахождением минимума специального вида квадратичной однородной функции на многообразии Штифеля. Исследованы квадратичные оптимизационные модели для трех вариантов этой задачи и соответствующие им двойственные оценки. На тестовых примерах показано, что их можно эффективно использовать при нахождении глобального минимума. В подразделе 6.3 исследуется задача нелинейного программирования с билинейной целевой

функцией, линейными и квадратичными ограничениями, которая описывает связь между конечным выпуском и добавленной стоимостью в статических моделях Леонтьева.

В седьмом разделе рассмотрены математические модели и методы решения для ряда прикладных экстремальных задач, где существенную роль играют субградиентные методы минимизации негладких функций. В подразделе 7.1 рассмотрены математические модели, методы и программное обеспечение для двух семейств задач нахождения пропускных способностей дуг надежной (отказоустойчивой) ориентированной сети. Математические модели представлены задачами линейного программирования большой размерности с блочной структурой матрицы ограничений. В подразделе 7.2 рассмотрены две задачи нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий, которые сформулированы как многоэкстремальные задачи нелинейного программирования со сложным видом целевой функции. Обсуждаются вопросы нахождения локальных экстремумов этих задач и анализируются способы вычисления градиента целевой функции в зависимости от количества слоев в оптическом покрытии. В подразделе 7.3 рассмотрено семейство математических моделей для определения электрических нагрузок параллельно работающих энергоблоков в энергосистеме с возможностью управления загрузкой (маневренностью) отдельного семейства энергоблоков. Математические модели представлены специальными задачами нелинейного программирования. В подразделе 7.4 рассмотрена проблема поиска вектора минимальной длины в выпуклой оболочке конечного набора векторов конечномерного евклидова пространства. Она сводится к негладкой экстремальной задаче, для которой устанавливается величина штрафного параметра.

Выводы содержат основные результаты, полученные в диссертационной работе. Список использованной литературы включает 210 наименований.

Раздел 1

Три центральные научные идеи Н.З. Шора

В 1962 году Н.З. Шор опубликовал работу [123], к которой восходит идея субградиентного метода минимизации негладких выпуклых функций. В этой работе для решения транспортных задач в матричной и сетевой формах он предложил использовать метод спуска в пространстве двойственных переменных (пространстве потенциалов). Впоследствии этот метод получил название метода обобщенного градиентного спуска (ОГС). Метод ОГС сначала применялся для минимизации кусочно-гладких выпуклых функций, а затем для общего класса задач выпуклого программирования. Последующие усовершенствования метода ОГС дали ряд численных методов оптимизации негладких (недифференцируемых) функций, которые существенно повлияли на развитие линейного, нелинейного, дискретного и стохастического программирования.

В этом разделе¹ описаны три важнейших идеи Н.З. Шора в негладкой оптимизации: обобщенный градиентный спуск (1962), использование линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций (1969), двойственный подход к получению и уточнению оценок в невыпуклых квадратичных моделях (1985). На основе первых двух идей получен ряд фундаментальных результатов в негладкой оптимизации [130], а на основе третьей идеи получен ряд важных результатов в многоэкстремальной оптимизации и теории графов [198].

Предложенный Н.З. Шором в [123] алгоритм, позволяющий минимизировать выпуклые функции с разрывным градиентом, приобрел большую значимость в силу многочисленных практических приложений. Именно с него началось планомерное исследование метода обобщенного градиентного спуска, который получил в дальнейшем название субградиентного метода [54].

¹Материал раздела базируется на работе [56] и пленарном докладе [57] на 3-ей Международной научной конференции „Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии“, посвященной 75-летию со дня рождения Наума Зуселевича Шора (Кишинэу, 19–23 марта 2012 года).

1.1 Субградиентный метод

О сути проблем, связанных с минимизацией недифференцируемых функций, и о вкладе Н.З. Шора в их разрешение замечательно написал Б.Т. Поляк [47]: «Основные алгоритмы минимизации гладких функций – градиентный и Ньютона – были построены на использовании линейной и квадратичной аппроксимации функции, задаваемой первыми членами ряда Тейлора. Однако, для недифференцируемой функции эта идея неприменима – такая функция не может быть хорошо аппроксимирована ни линейной, ни квадратичной функциями... Поэтому разработка методов минимизации негладких функций требует привлечения новых идей. Одна из них, принадлежащая Н.З. Шору, выглядит несколько неожиданно. Пишется прямой аналог градиентного метода с заменой градиента на произвольный субградиент $g_f(x)$ функции $f(x)$:

$$x_{k+1} = x_k - \gamma_k g_f(x_k). \quad (1.1)$$

... Значения функции в методе (1.1) не могут убывать монотонно. Оказывается, однако, что при этом монотонно убывает другая функция – расстояние до точки минимума, и в этом-то заключается основная идея субградиентного метода (1.1).»

Пусть $f(x)$ – выпуклая функция, определенная в евклидовом пространстве E^n , X^* – множество минимумов (которое может быть и пустым), $x^* \in X^*$ – точка минимума; $\inf_{x \in E^n} f(x) = f^*$; $g_f(x)$ – субградиент (произвольный) функции $f(x)$ в точке x .

Определение 1.1 *Субградиентом выпуклой функции $f(x)$ в точке \bar{x} называется вектор $g_f(\bar{x})$, удовлетворяющий неравенству*

$$f(x) - f(\bar{x}) \geq (g_f(\bar{x}), x - \bar{x}) \quad \text{для всех } x \in E^n. \quad (1.2)$$

Здесь (\cdot, \cdot) – скалярное произведение векторов из E^n .

Если $f(x)$ – непрерывно дифференцируема в точке \bar{x} , то субградиент $g_f(\bar{x})$ определяется однозначно и совпадает с $\nabla f(\bar{x})$ – градиентом функции $f(x)$ в

точке \bar{x} . В точках негладкости функции $f(x)$ субградиент $g_f(\bar{x})$ определяется неоднозначно.

Из неравенства (1.2) следует, что если $f(x) < f(\bar{x})$, то субградиент $g_f(\bar{x})$ удовлетворяет неравенству

$$(-g_f(\bar{x}), x - \bar{x}) > 0. \quad (1.3)$$

Геометрически формула (1.3) означает, что антисубградиент в точке \bar{x} образует острый угол с произвольным направлением, проведенным из точки \bar{x} в точку x с меньшим значением $f(x)$. Отсюда, если X^* непусто и $\bar{x} \notin X^*$, то при сдвиге из точки \bar{x} в направлении $-g_f(\bar{x})$ с достаточно малым шагом расстояние до X^* убывает. Этот простой факт является центральной идеей субградиентного метода минимизации негладких функций, и именно о нем идет речь в приведенной выше цитате Б.Т. Поляка.

Определение 1.2 *Субградиентным методом называется процедура построения последовательности $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ по правилу*

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{g_f(x_k)}{\|g_f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.4)$$

где x_0 — начальное приближение, h_k — шаговый множитель, $g_f(x_k)$ — произвольный субградиент функции $f(x)$ в точке x_k . Если $g_f(x_k) = 0$, то x_k является точкой минимума функции $f(x)$ и процесс (1.4) останавливается.

Наиболее общий результат о сходимости субградиентного метода связан с классическими условиями регулировки шага.

Теорема 1.1 [130]. Пусть $f(x)$ — выпуклая функция с ограниченной областью минимумов X^* , $\{h_k\}_{k=0}^{\infty}$ — последовательность чисел, обладающая свойствами

$$h_k > 0; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} h_k = 0; \quad \sum_{k=0}^{\infty} h_k = +\infty.$$

Тогда последовательность $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$, полученная по формуле (1.4), при произвольном $x_0 \in E^n$ обладает одним из следующих свойств: либо найдется

такое $k = k^*$, что $x_{k^*} \in X^*$, либо $\lim_{k \rightarrow \infty} \min_{x \in X^*} \|x_k - x\| = 0$, $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = \min_{x \in E^n} f(x) = f^*$.

Теорема 1.1 является одним из ярких результатов применения идеи Шора (1962). Не менее ярким результатом применения этой же идеи является предложенный Б.Т. Поляком субградиентный метод

$$x_{k+1} = x_k - h_k^* \frac{g_f(x_k)}{\|g_f(x_k)\|}, \quad h_k^* = \frac{f(x_k) - f^*}{\|g_f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.5)$$

где регулировка шага использует априорное знание значения функции в точке минимума [47]. Здесь шаговый множитель h_k^* гарантирует уменьшение расстояния до множества X^* на каждой итерации метода (1.5).

Величину h_k^* называют шагом Поляка или шагом Агмона-Моцкина-Шенберга [15]. Этот шаг тесно связан с результатами И.И. Еремина о сходимости итерационных методов аппроксимации неподвижных точек с помощью операторов, обладающих свойством квазисжимаемости (фейеровости). Подробное изложение результатов по итерационным процессам фейеровского типа дано в [8].

Имеется несколько вариантов доказательства теоремы 1.1 или ее аналога для субградиентного процесса в форме (1.1). Все они основаны на изучении поведения последовательности $\{\rho_k\}_{k=0}^{\infty}$, где $\rho_k = \min_{x \in X^*} \|x_k - x\|$. Наиболее общий результат (для случая выпуклых функций, определенных в гильбертовом пространстве, когда минимизация производится при наличии ограничений) получен Б.Т. Поляком в 1967 году [45]. Аналогичный результат для конечномерного случая получен Ю.М. Ермольевым в 1966 году [16]. Оба указанных результата используют принцип доказательства от противного и не содержат конструктивных механизмов их распространения на специальные классы выпуклых функций.

Конструктивный механизм содержит доказательство теоремы 1.1, принадлежащее Н.З. Шору (1969, Труды I Зимней школы по математическому программированию, Дрогобыч) [124]. Оно использует вспомогательный результат о свойстве субградиентного процесса с постоянным шагом [130].

Лемма 1.1 Пусть в субградиентном методе (1.4) используется регулировка шага $h_k = h$, $h > 0$ для всех $k = 0, 1, \dots$. Тогда для любого $\varepsilon > 0$ и $x^* \in X^*$ найдутся такие $k = k^*$ и $\bar{x} \in E_n$, что будет выполняться свойство

$$f(\bar{x}) = f(x_{k^*}), \text{ причем } \|\bar{x} - x^*\| < \frac{h}{2}(1 + \varepsilon).$$

Лемма 1.1 гарантирует уменьшение расстояния до точек области минимумов только в случае достаточно большого расстояния от множества минимумов до точек x_k . Однако с помощью этой леммы можно обосновать сходимость субградиентного метода при дополнительных предположениях о свойствах минимизируемой функции. Так, например, если множество минимумов содержит сферу радиуса $r > h/2$, то субградиентный метод с постоянным шагом h гарантирует нахождение такого k^* , что $x_{k^*} \in X^*$.

При определенных дополнительных предположениях о свойствах функции $f(x)$ были получены субградиентные методы, сходящиеся со скоростью геометрической прогрессии [130].

Теорема 1.2 Пусть $f(x)$ – выпуклая функция, определенная на E^n , и для всех $x \in E^n$ при некотором φ ($0 \leq \varphi < \pi/2$) выполняется неравенство

$$(g_f(x), x - x^*(x)) \geq \cos \varphi \|g_f(x)\| \cdot \|x - x^*(x)\|, \quad (1.6)$$

где $x^*(x)$ – точка, принадлежащая множеству минимумов функции $f(x)$ и лежащая на кратчайшем расстоянии от x . Тогда, если при заданном x_0 выбрать величину h_0 , удовлетворяющую неравенству

$$h_0 \geq \begin{cases} \|x^*(x_0) - x_0\| \cos \varphi, & \pi/4 \leq \varphi < \pi/2, \\ \|x^*(x_0) - x_0\| / (2 \cos \varphi), & 0 \leq \varphi < \pi/4, \end{cases}$$

определить $\{h_k\}_{k=0}^{\infty}$ в соответствии с рекуррентной формулой

$$h_{k+1} = h_k r(\varphi), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

где

$$r(\varphi) = \begin{cases} \sin \varphi, & \pi/4 \leq \varphi < \pi/2, \\ 1 / (2 \cos \varphi), & 0 \leq \varphi < \pi/4, \end{cases}$$

и вычислить $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ по формуле (1.4), то либо при некотором k^* имеем $g_f(x_{k^*}) = 0$ и x_{k^*} принадлежит области минимумов, либо при всех $k = 0, 1, 2, \dots$ выполняется неравенство

$$\|x_k - x^*(x_k)\| \leq \begin{cases} h_k / \cos \varphi, & \pi/4 \leq \varphi < \pi/2, \\ 2 \cos \varphi \cdot h_k, & 0 \leq \varphi < \pi/4. \end{cases}$$

Таким образом, если угол φ заранее известен, то, регулируя шаг по формулам теоремы 1.2, можно получить сходимость к минимуму со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $q = r(\varphi)$. В формуле (1.6) величина $\cos \varphi$ характеризует степень вытянутости поверхностей уровня функции $f(x)$. Если не существует угла $\varphi < \pi/2$, такого, что для любого x выполняется (1.6), то такую функцию называют существенно овражной. При минимизации существенно овражных функций приведенный в теореме 1.2 способ регулировки шаговых множителей неприменим. В этом случае следует использовать универсальный способ выбора шаговых множителей, указанный в теореме 1.1.

Особо следует выделить сходящийся со скоростью геометрической прогрессии вариант субградиентного метода, где шаговый множитель остается в течение определенного числа итераций постоянным, а затем уменьшается в два раза [130].

Теорема 1.3 Пусть выпуклая функция $f(x)$ определена на E^n , x^* – единственная точка минимума $f(x)$ и заданы начальное приближение x_0 и числа σ и h_0 , причем $\sigma \geq 2$, $h_0 \geq \|x_0 - x^*\| / \sigma$. Рассмотрим множество

$$Y = \{y : \|y - x^*\| \leq \sigma h_0\}$$

и пусть для любой пары точек $x, z \in Y$ такой, что $f(x) = f(z) \neq f(x^*)$, выполняется условие

$$\|x - x^*\| \leq \sigma \|z - x^*\|.$$

Рассмотрим субградиентный метод (1.4), где $h_k = h_0 \cdot 2^{-\lfloor k/N \rfloor}$. Здесь $\lfloor a \rfloor$ – целая часть числа a . При достаточно большом h_0 и $N \geq 3\sigma^2 + 1$ выполня-

ется неравенство

$$\|x_k - x^*\| \leq 2\sigma h_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Теорема 1.3 сформулирована в терминах, характеризующих степень «вытянутости» поверхностей уровня, и легко видеть, что чем больше σ , тем меньшей будет скорость сходимости субградиентного метода.

Ступенчатая регулировка шага, как и в теореме 1.3, была использована в 1967 году Н.З. Шором и М.Б. Щепакимым при построении (на основе субградиентного метода) алгоритма решения двухэтапной задачи стохастического программирования. Вопросы, связанные со ступенчатой регулировкой шага для метода ОГС, остаются актуальными и сейчас. Так, например, в недавней работе Е.А. Нурминского [41] доказана сходимость фейеровских процессов с общей адаптивной схемой управления шаговыми множителями. Она связана со ступенчатой регулировкой шага, где шаговый множитель уменьшается в несколько раз не через фиксированное количество итераций, а определяется автоматически при решении вспомогательной задачи нахождения вектора минимальной длины в выпуклой оболочке накопленных ранее векторов (субградиентов).

Наиболее интенсивно исследования по субградиентным методам в Институте кибернетики проводились в 60–70 годы прошлого столетия. Параллельно они проводились учеными из других научных центров СССР, например И.И. Ереминым (Свердловск) и Б.Т. Поляком (Москва) для решения задач выпуклого программирования с ограничениями [14, 45]. Следует отметить, что результаты по субградиентным методам, полученные в СССР, вызвали огромный интерес за рубежом [154], когда в них увидели ключ к решению задач большой размерности. Так, например, использование схем декомпозиции для решения блочных задач линейного и нелинейного программирования приводит к сравнительно небольшим задачам минимизации негладких функций от связывающих переменных или от множителей Лагранжа для связывающих ограничений.

Отметим, что субградиентные методы остаются актуальными и в настоя-

щее время. Так, несмотря на огромное быстродействие и значительную оперативную память современных компьютеров, имеются задачи с таким количеством переменных, для которых указанные методы являются единственным способом их решения. Субградиентные методы можно рассматривать как способ ускорения методов по типу покоординатного спуска, если взамен одной координаты рассматривать группу координат, зафиксировав остальные. Специальные модификации методов покоординатного спуска, например, пропагандируются Ю.Е. Нестеровым, как эффективный подход к решению оптимизационных задач «сверхвысоких» размеров [189].

1.2 Субградиентные методы с растяжением пространства

При решении практических задач субградиентные методы оказались медленно сходящимися, что привело к необходимости построения алгоритмов, которые были бы эффективными при минимизации овражных выпуклых функций. Здесь центральную роль сыграла вторая важная идея Н.З. Шора (1969). Она связана с применением линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения свойств оптимизируемой функции в преобразованном пространстве переменных и восходит к работе Н.З. Шора и В.И. Билецкого [125]. Суть идеи Шора состоит в следующем.

Пусть на k -ой итерации субградиентного метода производится замена переменных $x = B_k y$, где B_k – неособенная $n \times n$ -матрица (т.е. существует обратная матрица $A_k = B_k^{-1}$). Субградиент выпуклой функции $f(x)$ в точке x_k удовлетворяет неравенству

$$f(x) \geq f(x_k) + (g_f(x_k), x - x_k) \quad \forall x \in E^n,$$

откуда, осуществляя замену переменных $x = B_k y$, получаем

$$\varphi(y) \geq \varphi(y_k) + (B_k^T g_f(x_k), y - y_k) \quad \forall y \in E^n.$$

Вектор $g_\varphi(y_k) = B_k^T g_f(x_k)$ удовлетворяет неравенству

$$\varphi(y) \geq \varphi(y_k) + (g_\varphi(y_k), y - y_k) \quad \forall y \in E^n$$

и является субградиентом выпуклой функции $\varphi(y) = f(B_k y)$ в точке $y_k = A_k x_k$ преобразованного пространства переменных $y = A_k x$.

Пусть к функции $\varphi(y)$ применяется субградиентный метод, где h_k – шаговый множитель в направлении нормированного антисубградиента. В преобразованном пространстве переменных $y = A_k x$ этот метод имеет вид

$$y_{k+1} = y_k - h_k \frac{g_\varphi(y_k)}{\|g_\varphi(y_k)\|} = y_k - h_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|} \quad (1.7)$$

и, следовательно, очередное приближение $x_{k+1} = B_k y_{k+1}$ будет получено по формуле

$$x_{k+1} = B_k y_k - h_k B_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|} = x_k - h_k B_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}. \quad (1.8)$$

Формулы (1.7) и (1.8) являются центральными в идее Шора (1969). Очевидно, что если их дополнить правилом рекуррентного пересчета матрицы $B_{k+1} = B_k T_k$, то получим наглядную интерпретацию субградиентного метода с последовательным (от одной итерации к другой) преобразованием пространства переменных.

Пусть x_0 – начальное приближение, B_0 – неособенная $n \times n$ -матрица. Тогда субградиентный метод с последовательным преобразованием пространства переменных имеет вид

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}, \quad B_{k+1} = B_k T_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (1.9)$$

где h_k – шаговый множитель, T_k – $n \times n$ -матрица, $g_f(x_k)$ – произвольный субградиент функции $f(x)$ в точке x_k .

Метод (1.9) принято называть B -формой субградиентного метода с преобразованием пространства; на каждой его итерации корректируется матрица, связанная с заменой переменных $y = Bx$. Его можно записать в H -форме (по типу методов переменной метрики) с помощью симметричной матрицы $H_k = B_k B_k^T$.

В 1969–1971 гг. под руководством Н.З. Шора построены два семейства субградиентных методов с растяжением пространства переменных, которые различаются выбором направления растяжения. В их основе лежит оператор

растяжения пространства, который в матрично-векторной форме имеет вид

$$R_\alpha(\xi) = I_n + (\alpha - 1)\xi\xi^T, \quad \xi \in E^n, \quad \|\xi\| = 1, \quad \alpha > 1,$$

где $(\cdot)^T$ означает транспонирование, I_n – единичная $n \times n$ -матрица, α – коэффициент растяжения пространства, ξ – направление растяжения. Подробно свойства оператора $R_\alpha(\xi)$ изложены в монографии [130].

При описании алгоритмов в B -форме (на каждой итерации корректируется матрица B_k) используется оператор

$$R_\beta(\xi) = R_\alpha^{-1}(\xi) = I_n + (\beta - 1)\xi\xi^T, \quad \beta = \frac{1}{\alpha} < 1.$$

Оператор $R_\beta(\xi)$ является обратным к оператору растяжения пространства $R_\alpha(\xi)$ и в методах с растяжением пространства переменных он обеспечивает пересчет матрицы B_{k+1} за $2n^2$ арифметических операций умножения.

В первом семействе субградиентных методов используется операция растяжения пространства в направлении субградиента. B -форму этого семейства методов можно описать следующим образом.

Определение 1.3 *Субградиентным методом с растяжением пространства в направлении субградиента называется процедура построения последовательностей $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ и $\{B_k\}_{k=0}^\infty$ по следующему правилу:*

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k, \quad B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\xi_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.10)$$

где

$$\xi_k = \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}, \quad \beta_k = \frac{1}{\alpha_k} < 1. \quad (1.11)$$

Здесь x_0 – начальное приближение, $B_0 = I_n$ – единичная $n \times n$ -матрица, h_k – шаговый множитель, α_k – коэффициент растяжения пространства, $g_f(x_k)$ – произвольный субградиент функции $f(x)$ в точке x_k . Если $g_f(x_k) = 0$, то x_k является точкой минимума функции $f(x)$, и процесс (1.10), (1.11) останавливается.

Первые эксперименты показали, что, выбирая $\alpha_k = 2$ и $h_k = \text{const}$, для многих примеров выпуклых овражных функций можно получить хорошие

результаты [125]. К сожалению, такой простой способ не всегда приводит к цели. Теоретически удалось обосновать такие алгоритмы, где шаговый множитель h_k и коэффициенты растяжения пространства α_k выбирались таким образом, чтобы последовательность расстояний до точки минимума в соответствующих преобразованных пространствах не возрастала [126]. Для этого использовалась дополнительная информация о функции $f(x)$ – значение функции в точке минимума f^* и так называемые постоянные роста M и N .

Теорема 1.4 Пусть $f(x)$ – выпуклая функция, определенная в E^n , и в некоторой сферической окрестности S_d , $S_d = \{x : \|x - x^*\| \leq d\}$, точки минимума x^* субградиент удовлетворяет двустороннему неравенству

$$N(f(x) - f(x^*)) \leq (g_f(x), x - x^*) \leq M(f(x) - f(x^*)), \quad (1.12)$$

где $M \geq N$ – положительные константы. Тогда, если в методе (1.10), (1.11) принять

$$x_0 \in S_d, \quad h_k = \frac{2MN}{M+N} \frac{f(x_k) - f(x^*)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}, \quad \alpha_k = \frac{M+N}{M-N},$$

то последовательность $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ удовлетворяет неравенству

$$\|A_k(x_k - x^*)\| \leq d, \quad A_k = B_k^{-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.13)$$

Из неравенства (1.13) следует локализация точки минимума x^* в эллипсоиде $\mathcal{E}_k = \{x : \|A_k(x_k - x)\| \leq d\}$ с центром в точке x_k . Отношение объемов эллипсоидов \mathcal{E}_{k+1} и \mathcal{E}_k задается следующим равенством:

$$\frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} = \beta_k = \frac{M-N}{M+N}.$$

Для выпуклых функций с постоянными роста M и N теорема 1.4 определяет вариант субградиентного метода с растяжением пространства в направлении субградиента, который сходится со скоростью геометрической прогрессии по отклонению наилучшего достигнутого значения $f(x)$ от оптимального $f^* = f(x^*)$. Это обеспечивает выполнение неравенства (1.13), в соответствии с которым объем эллипсоида, в котором локализуется точка x^* , убывает со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\frac{M-N}{M+N}$.

Для квадратичной положительно-определенной функции в неравенстве (1.12) можно выбирать $M=N=2$. Для кусочно-линейной функции, надграфик которой представляет собой конус с вершиной в точке (x^*, f^*) , можно выбирать $M=N=1$. Если в методе (1.10), (1.11) выбрать $\beta_{k+1} = \beta = 0$, то этим случаям соответствуют алгоритмы, которые сходятся за число шагов, не превышающее n . Решение невырожденной системы n линейных уравнений с n неизвестными $(a_i, x) + b_i = 0, i = 1, \dots, n$, можно заменить нахождением минимума $f(x) = \max_{1 \leq i \leq n} |(a_i, x) + b_i|$. Если взять $f^* = 0, \beta_k = 0$ и применить метод (1.10), (1.11), то получим алгоритм, соответствующий известной конечной процедуре решения линейных алгебраических систем – методу ортогонализации градиентов.

Известный метод эллипсоидов² является частным случаем методов с растяжением пространства в направлении субградиента [128].

Теорема 1.5 Пусть $f(x)$ – выпуклая функция, определенная в E^n , и начальное приближение x_0 такое, что существует точка $x^* \in X^*$, для которой выполняется $\|x_0 - x^*\| \leq d$. Тогда, если в методе (1.10), (1.11) принять

$$h_0 = \frac{d}{n+1}, \quad h_{k+1} = h_k \frac{n}{\sqrt{n^2-1}}, \quad \alpha_k = \alpha = \sqrt{\frac{n+1}{n-1}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

то последовательность $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ удовлетворяет неравенству

$$\|A_k(x_k - x^*)\| \leq h_k(n+1), \quad A_k = B_k^{-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.14)$$

Множество точек x , удовлетворяющих неравенству

$$\|A_k(x_k - x)\| \leq (n+1)h_k = d \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}} \right)^k,$$

представляет собой эллипсоид \mathcal{E}_k . Его объем $\text{vol}(\mathcal{E}_k)$ определяется по формуле

$$\text{vol}(\mathcal{E}_k) = \frac{v_0 d^n \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}} \right)^{nk}}{\det A_k},$$

²Первыми метод эллипсоидов в H -форме предложили Д.Б. Юдин и А.С. Немировский [149], исходя из методов последовательных отсечений.

где v_0 – объем единичного n -мерного шара. Отсюда получаем

$$\begin{aligned} \frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} &= \frac{\left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^n \cdot \det A_k}{\det A_{k+1}} = \frac{\left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^n \cdot \det A_k}{\det R_\alpha(\xi_k) \cdot \det A_k} = \\ &= \frac{1}{\alpha} \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^n = \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^n = q_n \approx 1 - \frac{1}{2n^2}. \end{aligned}$$

Следовательно, объем эллипсоида, в котором локализуется точка x^* , в соответствии с неравенством (1.14) убывает со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q_n . Этот знаменатель зависит лишь от n – размерности пространства переменных и не зависит от свойств минимизируемой функции $f(x)$. Благодаря этому факту, метод эллипсоидов сыграл важную роль в теории сложности задач математического программирования. На его основе в 1979 г. Л. Г. Хачиян построил и обосновал первый полиномиальный алгоритм решения задачи линейного программирования с рациональными коэффициентами [119, 120]. Метод эллипсоидов позволил обосновать полиномиальные алгоритмы для ряда комбинаторных задач [174, 175].

Опыт применения алгоритмов с растяжением пространства в направлении субградиента показал существенное ускорение субградиентных процессов. Однако оказалось, что такие методы в принципе не могут быть монотонными. Это связано с простым геометрическим фактом: если мы находимся на границе двух «кусков» кусочно-гладкой поверхности уровня, а градиенты к этим гладким «кускам», вычисленные в данной точке, образуют тупой угол, то никакое растяжение пространства в направлении градиентов не может превратить этот угол в острый, он может лишь приближаться к $\pi/2$, оставаясь тупым. Применяя растяжение пространства в направлении субградиента, невозможно получить направление убывания функции в виде антиградиента к одному из кусков в растянутом пространстве. В то же время растяжение пространства в направлении разности двух указанных градиентов с достаточным коэффициентом растяжения превращает тупой угол между градиентами в острый, т.е. соответствующие образы этих антиградиентов в растянутом пространстве становятся направлениями убывания функции.

Это стимулировало разработку второго семейства субградиентных методов, в которых используется растяжение пространства в направлении разности двух последовательных субградиентов. Эти методы получили название r -алгоритмов (от русского слова «разность») и стали одним из центральных результатов докторской диссертации Н.З. Шора (1970). Выбор шагового множителя в r -алгоритмах связан с поиском минимума функции по направлению. При определенной регулировке шага и коэффициентов растяжения пространства они являются монотонными по минимизируемой функции.

Приведем описание r -алгоритмов в B -форме для минимизации выпуклой функции $f(x)$, определенной в E^n . Будем предполагать, что $f(x)$ имеет ограниченную область минимумов X^* , т.е. $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = +\infty$.

Определение 1.4 r -алгоритмом называется процедура построения последовательностей $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ и $\{B_k\}_{k=0}^{\infty}$ по следующему правилу:

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k, \quad B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.15)$$

где

$$\xi_k = \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}, \quad h_k \geq h_k^* = \arg \min_{h \geq 0} f(x_k - h B_k \xi_k), \quad (1.16)$$

$$\eta_k = \frac{B_k^T r_k}{\|B_k^T r_k\|}, \quad r_k = g_f(x_{k+1}) - g_f(x_k), \quad \beta_k = \frac{1}{\alpha_k} < 1. \quad (1.17)$$

Здесь x_0 — начальное приближение, $B_0 = I_n$ — единичная $n \times n$ -матрица³, h_k — шаговый множитель, α_k — коэффициент растяжения пространства, $g_f(x_k)$ и $g_f(x_{k+1})$ — произвольные субградиенты функции $f(x)$ в точках x_k и x_{k+1} . Если $g_f(x_k) = 0$, то x_k является точкой минимума функции $f(x)$ и процесс (1.15)–(1.17) останавливается.

Применительно к задачам минимизации гладких функций r -алгоритмы по своей формальной структуре близки к алгоритмам квазиньютоновского типа с переменной метрикой. Так предельный вариант r -алгоритма с бесконечным коэффициентом растяжения (здесь $\beta_k = \beta = 0$, $h_k = h_k^*$) является проектив-

³В качестве матрицы B_0 часто выбирают диагональную матрицу D_n с положительными элементами на диагонали, с помощью которой осуществляется масштабирование переменных.

ным вариантом метода сопряженных градиентов [127]. Для задачи минимизации выпуклой непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ предельный вариант r -алгоритма с восстановлением матрицы B_k после каждых n итераций обладает квадратичной скоростью сходимости при обычных условиях гладкости и регулярности $f(x)$ [130].

В 1998-1999 гг. Н.Г. Журбенко на основе использования операторов растяжения пространства построил семейство методов сопряженных градиентов и семейство квазиньютоновских методов при конечных значениях коэффициентов растяжения [19, 20]. В них известные квазиньютоновское условие и условие C -ортогональности⁴ векторов имеют наглядную геометрическую интерпретацию [23]. Их содержательный смысл состоит в том, что образ (в пространстве $Y_k = A_k X$) вектора смещения в пространстве $Y_{k-1} = A_{k-1} X$ должен являться собственным вектором матрицы $C_k = B_k^T C B_k$, которая определяет квадратичную форму в пространстве Y_k .

Замечательное свойство r -алгоритма заключается в том, что его конкретные реализации показывают очень хорошие результаты при минимизации овражных функций. Одним из эффективных зарекомендовал себя вариант $r(\alpha)$ -алгоритма с постоянным коэффициентом растяжения пространства α и адаптивным способом регулировки шага. В нем величина h_k настраивается в процессе выполнения одномерного спуска в направлении нормированного антисубградиента в преобразованном пространстве переменных с помощью параметров h_0^0, q_1, n_h, q_2 . Здесь h_0^0 – величина начального шага (используется на первой итерации, на каждой последующей итерации уточняется); q_1 – коэффициент уменьшения шага ($q_1 \leq 1$), если условие завершения спуска по направлению ($h_k^0 > h_k^*$) выполняется всего за один шаг одномерного спуска; натуральное число n_h задает число шагов одномерного спуска ($n_h > 1$), через каждые n_h шагов h_k^0 будет увеличиваться в q_2 раз, где q_2 – коэффициент увеличения шага ($q_2 \geq 1$). Подробные рекомендации по выбору коэффициента растяжения пространства и параметров адаптивной регулировки шага приведены в [136, с. 45–47]. Суть их выбора состоит в том, чтобы адаптивный

⁴Здесь C – неотрицательно определенная симметричная $n \times n$ -матрица.

способ регулировки шага позволял увеличивать точность поиска минимума функции по направлению в процессе счета, при этом число шагов по направлению не должно превышать в среднем двух-трех на одну итерацию.

За последние 40 лет в Институте кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины накоплен значительный опыт решения оптимизационных задач с помощью r -алгоритма. К настоящему времени усилиями Н.З. Шора и его учеников Н.Г. Журбенко, Л.П. Шабашовой, В.И. Гершовича, А.В. Кунцевича, П.И. Стецюка, А.П. Лиховида и др. разработано несколько модификаций r -алгоритма применительно к решению различных задач оптимизации [24, 140, 178, 144]. Эти модификации использовались в задачах линейного и нелинейного программирования, блочных задачах с различными схемами декомпозиции, при решении минимаксных и матричных задач оптимизации, для вычисления двойственных лагранжевых оценок в многоэкстремальных и комбинаторных задачах оптимизации [137, 139, 143, 30]. На практике они применялись для решения задач оптимального планирования, оптимального проектирования, синтеза и анализа сетей, восстановления изображений, эллипсоидальной аппроксимации и локализации и др. Модификации r -алгоритмов стали центральными методами в системах поддержки и принятия решений для планирования структурно-технологических преобразований на основе семейства оптимизационных межотраслевых моделей с переменными коэффициентами прямых затрат [55]. На основе r -алгоритма разработан ряд популярных интервальных программ для систем компьютерной математики Scilab и Matlab [122].

Несмотря на то, что r -алгоритмы используются уже 40 лет, проблема обоснования их сходимости для всего класса выпуклых функций остается открытой и в настоящее время. Еще в 1982 г. Н.З. Шор и В.И. Гершович в работе [9] отметили: «Теория всего класса алгоритмов с растяжением пространства далека от совершенства. Нам кажется достаточно реалистичной целью – построение такого алгоритма, который по своей практической эффективности не уступал бы r -алгоритму и был столь же хорошо обоснован, как метод

эллипсоидов».

Шагом в этом направлении можно считать разработанный Н.Г. Журбенко $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритм [17, 18, 21]. Он основан на процедуре одномерного спуска, является в некотором смысле монотонным, обеспечивает решение задачи с заданной точностью за конечное число итераций. На каждой итерации $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритма преобразование состоит в применении операторов растяжения пространства по ортогональным направлениям. Параметры преобразования определяются построением эллипсоидов локализации ε -решения. Эллипсоиды локализации строятся на основе информации, получаемой в результате применения процедуры одномерной минимизации. На каждой итерации $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритма обеспечивается уменьшение объема локализации ε -решения в не менее чем заданное число q раз (параметр алгоритма).

Если в результате процедур одномерной минимизации происходит существенное улучшение рекордного значения функции, то преобразование пространства определяется оператором растяжения по направлению агрегированного субградиента. В противном случае за конечное число одномерных процедур минимизации гарантируется генерация (по крайней мере) двух ε -субградиентов с настолько тупым углом между ними, что он обеспечивает построение эллипсоида локализации ε -решения с требуемым уменьшением объема локализации. При этом преобразование пространства определяется операторами растяжения по $(n - 1)$ -му ортогональному направлению. Причем с максимальным коэффициентом производится растяжение по направлению разности двух ортонормированных субградиентов из выпуклой оболочки построенных субградиентов. Численные эксперименты показывают, что (по числу итераций) эффективность $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритма сравнима с эффективностью используемых модификаций r -алгоритма [25, 22]. Однако трудоемкость одной итерации в $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритме существенно больше, чем в r -алгоритме.

Следует подчеркнуть, что идея о применении линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения свойств оптимизируемой функции в преобразованном пространстве переменных оказалась эффективной в

выпуклой оптимизации. Модификации r -алгоритмов, разработанные на основе этой идеи Н.З. Шором и его учениками, являются эффективными для минимизации негладких функций. Мировую известность получил метод эллипсоидов – частный случай субградиентных методов с растяжением пространства в направлении субградиента. Конгресс по математическому программированию, который проводился в Бонне в 1982 г., был посвящен методу эллипсоидов и его приложениям. В избранных трудах конгресса [159] опубликован обзорный доклад Н. З. Шора «Generalized gradient methods of nondifferentiable optimization employing space dilatation operations», о методах негладкой оптимизации, разработанных в Институте кибернетики. Участие Н. З. Шора в работе этого конгресса во многом определило его третью идею, которая будет изложена в следующем разделе.

1.3 Двойственные оценки в экстремальных квадратичных задачах

Многие задачи булевого линейного программирования могут быть переформулированы как экстремальные квадратичные задачи с булевыми переменными. Так, например, условие булевости переменной $x \in \{0, 1\}$ представляется квадратичным равенством $x^2 - x = 0$. Если две булевы переменные x_i и x_j не могут одновременно принимать значение равное единице, то это условие может быть записано в виде равенства $x_i x_j = 0$ (равносильно линейному неравенству $x_i + x_j \leq 1$). Для экстремальных квадратичных задач Н.З. Шор предложил использовать двойственный подход к получению и уточнению оценок целевой функции (третья важная идея). В квадратичных задачах на минимум эти оценки будут границами снизу для минимального значения целевой функции, а в квадратичных задачах на максимум – границами сверху для максимального значения целевой функции.

Третья идея Н.З. Шора включает алгоритмы нахождения двойственных оценок на основе методов недифференцируемой оптимизации и использование функционально избыточных квадратичных ограничений (их добавление не изменяет множества допустимых решений исходной квадратичной зада-

чи) для улучшения точности двойственных оценок. Впервые двойственный подход к получению оценок предложен в работе Н.З. Шора и А.С. Давыдова (1985) для задач булевого программирования [132]. В 1986–1987 годах он был дополнен процедурами уточнения оценок и применен к другим многоэкстремальным задачам, в том числе и к задаче нахождения глобального минимума полинома [133, 134, 135]. Наиболее полное изложение результатов Н.З. Шора содержится в монографиях [198, 136]. Центральные из этих результатов отображены также в двух сборниках избранных трудов Н.З. Шора, изданных в 2008 и 2009 годах [147, 148].

Опишем суть двойственного подхода для получения и уточнения оценок в квадратичных экстремальных задачах на примере экстремальной квадратичной задачи с ограничениями-равенствами: найти

$$Q^* = \max_{x \in E^n} Q_0(x) \quad (1.18)$$

при ограничениях

$$Q_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.19)$$

Здесь квадратичные функции имеют вид

$$Q_i(x) = (K_i x, x) + (b_i, x) + c_i,$$

где K_i – симметричные вещественные $n \times n$ -матрицы, b_i – n -мерные векторы из E^n , c_i – вещественные числа, $i = 0, \dots, m$. Некоторые из функций $Q_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, m$ могут быть также линейными.

В общем случае задача (1.18), (1.19) многоэкстремальна и относится к классу NP -трудных задач. Оценки сверху для Q^* можно получить путем следующей лагранжевой релаксации. Пусть $u \in E^m$ – вектор множителей Лагранжа, соответствующий ограничениям (1.19). Функция Лагранжа для задачи (1.18), (1.19) имеет вид

$$L(x, u) = Q_0(x) + \sum_{i=1}^m u_i Q_i(x) \equiv (K(u)x, x) + (b(u), x) + c(u),$$

где

$$K(u) = K_0 + \sum_{i=1}^m u_i K_i, \quad b(u) = b_0 + \sum_{i=1}^m u_i b_i, \quad c(u) = c_0 + \sum_{i=1}^m u_i c_i.$$

Рассмотрим функцию

$$\Psi(u) = \max_{x \in R^n} L(x, u) \equiv \max_{x \in R^n} [(K(u)x, x) + (b(u), x) + c(u)].$$

Функция $\Psi(u)$ является выпуклой функцией от переменных u (как результат взятия операции максимума по переменным x для семейства линейных по переменным u функций).

Пусть $\lambda_{max}(K)$ – максимальное собственное число симметричной $n \times n$ -матрицы K . Область определения функции $\Psi(u)$ обозначим $\text{dom}\Psi$. Она состоит из $\Omega^- = \{u \in E^m : \lambda_{max}(K(u)) < 0\}$ (подмножество $u \in E^m$, для которых матрица $K(u)$ отрицательно определена) и подмножества тех точек $u \in \Omega^0 = \{u \in E^m : \lambda_{max}(K(u)) = 0\}$, для которых система линейных уравнений

$$2K(u)x + b(u) = 0 \tag{1.20}$$

имеет решение. Для всех других точек $\Psi(u) = +\infty$.

Если $\text{dom}\Psi \neq \emptyset$, то для любого $u \in \text{dom}\Psi$ значение функции $\Psi(u)$ является нетривиальной (т.е. неравной $+\infty$) оценкой сверху для Q^* – оптимального значения целевой функции в задаче (1.18), (1.19). Наилучшая оценка сверху для Q^* в классе лагранжевых оценок вида $\Psi(u)$ связана с решением следующей задачи негладкой оптимизации:

$$\Psi^* = \min_{u \in \text{dom}\Psi} \Psi(u). \tag{1.21}$$

Точками негладкости функции $\Psi(u)$ есть точки границы множества Ω^- , где система линейных уравнений (1.20) имеет неединственное решение.

Оценку Ψ^* с любой заданной точностью можно найти за полиномиальное время методом эллипсоидов [198, 136]). Оценка Ψ^* обладает следующими свойствами. Если минимум в (1.21) достигается на $u^* \in \Omega^-$, то $\Psi^* = Q^*$ (т.е. оценка точная, см. лемму 4.1 из [136], с. 90). При этом находится и точка глобального минимума $x^* = x(u^*)$, где $x(u^*)$ – решение системы (20) при $u = u^*$. Если же минимум в (1.21) достигается на границе области Ω^- , то может существовать так называемый «разрыв двойственности» $\Delta^* = \Psi^* - Q^* > 0$. Один из способов уменьшения Δ^* связан с введением функционально избы-

точных ограничений (при этом может увеличиться и количество переменных в задаче).

Функционально избыточные ограничения – это ограничения, добавление которых не изменяет множества допустимых решений начальной квадратичной задачи. Однако при этом изменяется функция Лагранжа, что в некоторых случаях позволяет уменьшить Δ^* . Если к задаче (1.18), (1.19) прибавить функционально избыточные ограничения $Q_{m+1}(x) = 0, \dots, Q_{m+r}(x) = 0$, $r \geq 1$, то новая квадратичная задача примет вид: найти

$$Q^* = \max_{x \in R^n} Q_0(x) \quad (1.22)$$

при ограничениях

$$Q_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m + r. \quad (1.23)$$

Теорема 1.6 Если Ψ_1^* является оценкой вида Ψ^* для задачи (1.22), (1.23), то $\Psi_1^* \leq \Psi^*$.

Теорема 1.6 не только констатирует, что функционально избыточные ограничения могут улучшить точность двойственной оценки, но и поясняет, что это улучшение есть следствием увеличения количества множителей Лагранжа [198]. Ограничения, которые являются линейными комбинациями уже существующих ограничений, не отражаются на точности двойственной оценки, т.е. $\Psi_1^* = \Psi^*$. Вклад таких ограничений в функцию Лагранжа эквивалентен лишь определенному изменению множителей Лагранжа при существующих ограничениях. Однако добавление функционально избыточных ограничений, которые являются нетривиальными следствиями из условий задачи, в ряде случаев приводит к тому, что двойственная оценка Ψ_1^* может стать точной для Q^* .

Функционально избыточными могут служить такие ограничения:

- а) квадратичные следствия линейных ограничений: например, квадратичное ограничение в форме $(b_i^T x + c_i)(b_j^T x + c_j) \geq 0$ является следствием из двух линейных ограничений-неравенств: $b_i^T x + c_i \geq 0$ и $b_j^T x + c_j \geq 0$;

- б) квадратичные ограничения, которые характеризуют неоднозначность представления произведения трех либо большего числа переменных задачи. Как правило, они имеют место при сведении полиномиальной задачи к квадратичной. Например, имеются переменные x_1 , $x_2 = x_1^2$ и $x_3 = x_1^3$. Тогда квадратичное ограничение $x_2^2 - x_1x_3 = 0$ является следствием неоднозначного представления x_1^4 , а именно $x_1^4 = (x_1^2)^2 = (x_1^3)(x_1)$;
- в) квадратичные ограничения, которые являются следствиями булевости или бинарности переменных задачи. Например, для бинарных переменных $x_i^2 = 1$, $x_j^2 = 1$, $x_k^2 = 1$ всегда справедливо квадратичное неравенство $x_ix_j + x_ix_k + x_jx_k \geq -1$.

Более детальную информацию о семействах функционально избыточных ограничений, их использовании для нахождения глобального минимума полинома и в экстремальных задачах на графах (максимальное устойчивое множество вершин графа, максимальный разрез графа и др.) можно найти в монографиях [198], [136].

Чрезвычайно интересными оказались результаты, полученные Н.З. Шором для NP -полной задачи нахождения взвешенного максимального независимого множества вершин графа [198]. Эта задача играет большую роль в многочисленных приложениях: теории информации и кодировании, проектировании различных устройств при определенных условиях несовместности; она тесно связана с известными задачами выбора, разбиения множеств, раскраски графов и другими комбинаторными задачами, имеющими массу приложений. Двойственные оценки Шора для этой задачи тесно связаны с известными числами Ловаса $\theta(G, w)$ и $\theta'(G, w)$ [186, 195], которые играют большую роль при обосновании результатов о полиномиальной разрешимости ряда задач в теории графов.

Пусть $G=(V, E)$ – взвешенный неориентированный граф с множеством вершин V и множеством ребер E , вес каждой вершины $i \in V$ задан положительным целым числом w_i . Подмножество вершин $S \subseteq V$ называется устойчивым (или независимым) множеством графа G , если для любых $i, j \in S$ ребро (i, j)

не принадлежит E . Взвешенное число устойчивости графа G определяется как $\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in S} w_i$, где $S \subseteq V$ – устойчивое множество. Множество S^* , на котором достигается $\alpha(G, w)$, называется максимальным взвешенным устойчивым (или независимым) множеством. Задача нахождения $\alpha(G, w)$ является NP -трудной даже в частном случае, когда все веса равны единице [175]. Поэтому вычисление верхних оценок, достаточно хорошо аппроксимирующих сверху $\alpha(G, w)$, имеет как практический, так и теоретический интерес. Н.З. Шор предложил три верхних оценки для $\alpha(G, w)$.

Первую оценку обозначим $\Psi_1^*(G, w)$. Она связана с формулировкой задачи о максимальном взвешенном устойчивом множестве графа в виде следующей квадратичной булевой задачи:

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (1.24)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (1.25)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V. \quad (1.26)$$

Здесь булева переменная $x_i \in \{0, 1\}$ равна единице, если вершина $i \in V$ включается в устойчивое множество, и равна нулю в противном случае. Булевы переменные для всех вершин описаны квадратичными ограничениями – равенствами (1.26). Квадратичные ограничения (1.25) означают, что если две вершины связаны ребром в графе G , то они обе не могут одновременно принадлежать устойчивому множеству.

Вторая оценка (обозначим ее $\Psi_2^*(G, w)$) соответствует квадратичной задаче, в которой к ограничениям (1.25), (1.26) добавлено следующее семейство функционально избыточных ограничений:

$$x_i x_j \geq 0 \quad \forall (i, j) \notin E. \quad (1.27)$$

Они являются следствиями неравенств $x_i = x_i^2 \geq 0$ для всех $i \in V$.

Третья оценка $\Psi_3^*(G, w)$ связана с квадратичной задачей, в которой к ограничениям (1.25)–(1.27) добавлено семейство функционально избыточных огра-

ничений

$$x_i x_k + x_j x_k \leq x_k \quad \forall (i, j) \in E, \quad k \neq i, j. \quad (1.28)$$

Квадратичные ограничения (1.28) в форме неравенств содержат все возможные квадратичные ограничения, построенные по следующему правилу. Для булевых переменных x_i и x_j , когда $(i, j) \in E$ и вершины i и j не могут одновременно включаться в устойчивое множество, всегда справедливо линейное неравенство $x_i + x_j \leq 1$. Если его умножить на переменную x_k такую, что $k \neq i, j$, то знак неравенства не изменится в силу того, что $x_k = x_k^2 \geq 0$. В результате получаем квадратичное неравенство $x_i x_k + x_j x_k \leq x_k$, справедливое для $(i, j) \in E$ и $k \neq i, j$.

Результаты о точности всех трех оценок Шора и их связь с числами Ловаса содержатся в следующей теореме [198].

Теорема 1.7 *Для оценок $\Psi_1^*(G, w)$, $\Psi_2^*(G, w)$ и $\Psi_3^*(G, w)$ справедливо неравенство*

$$\Psi_1^*(G, w) = \theta(G, w) \geq \Psi_2^*(G, w) = \theta'(G, w) \geq \Psi_3^*(G, w) \geq \alpha(G, w).$$

Следовательно, оценки Шора $\Psi_1^*(G, w)$ и $\Psi_2^*(G, w)$ обладают такими же свойствами, как и числа Ловаса $\theta(G, w)$ и $\theta'(G, w)$, например, $\Psi_1^*(G, w) = \alpha(G, w)$, если граф G принадлежит семейству совершенных графов. Наиболее интересной оказалась третья оценка Шора $\Psi_3^*(G, w)$. Она всегда не хуже, чем оценка $\Psi_2^*(G, w)$, а наличие ограничений (1.28) придает ей ряд замечательных свойств, которые связаны со специальными семействами графов. Так, например, в [198] показано, что оценка $\Psi_3^*(G, w)$ является точной для $\alpha(G, w)$, когда граф G есть t -совершенным, либо h -совершенным.

Функционально избыточные ограничения сыграли огромную роль при получении эффективных оценок снизу для целевой функции в задачах нахождения глобального минимума полиномиальной функции $P(x)$ от одной или нескольких переменных. Эти задачи специальным образом сводятся к многоэкстремальным квадратичным задачам (на минимум) с определенными семействами функционально избыточных квадратичных ограничений. В [198]

доказано, что двойственная оценка для таких квадратичных задач совпадает со значением p^* полинома $P(x)$ в точке глобального минимума тогда и только тогда, когда полином $\bar{P}(x) = P(x) - p^*$ может быть представлен как сумма квадратов других полиномов. Эти результаты имеют отношение к классическим работам Д. Гильберта по разложению неотрицательных полиномиальных форм в сумму квадратов [49, 153, 176]. Разработанный Шором метод дает возможность не только доказать существование такой декомпозиции (если она существует), но и найти одно из возможных представлений полинома $\bar{P}(x)$ в виде суммы квадратов других полиномов. Более того, этим методом можно определить значение глобального минимума полинома $P(x)$.

Итак, третья идея Шора (1985), связанная с двойственным подходом для получения и уточнения оценок в квадратичных экстремальных задачах, может быть использована при создании эффективных методов решения тех многоэкстремальных задач, которые можно описать с помощью квадратичных моделей (такие модели встречаются во многих приложениях). Эффективность таких методов обеспечивается двумя моментами. Во-первых, двойственные оценки для квадратичных моделей являются более точными, чем оценки в линеаризованных аналогах этих моделей, и их использование в методе ветвей и границ может существенно сократить количество ветвлений. Во-вторых, использование функционально избыточных ограничений позволяет выделить среди многоэкстремальных задач такие их подклассы, которые разрешимы за полиномиальное время. При этом можно указать верхнюю границу сложности такого класса задач, которая зависит от количества квадратичных ограничений.

Особого внимания заслуживают и алгоритмы нахождения двойственных оценок в квадратичных моделях. Они являются альтернативой использованию методов внутренних точек для решения задач полуопределенного программирования (semidefinite programming), т.е. задач оптимизации, в которых в качестве ограничения фигурирует требование неотрицательной определенности некоторых матриц [141, 197]. Действительно, многие задачи полу-

определенного программирования целесообразно рассматривать как задачи недифференцируемой оптимизации и применять для их решения эффективные методы минимизации негладких выпуклых функций. Условие неотрицательной определенности симметричной $(n \times n)$ -матрицы X (принято обозначать $X \succeq 0$) эквивалентно тому, что минимальное собственное число матрицы X неотрицательное: $\lambda_{\min}(X) \geq 0$. Но $\lambda_{\min}(X)$ – вогнутая недифференцируемая функция элементов матрицы, т.е. если элементы матрицы $X(u) = \{x_{ij}\}_{i,j=1}^n$ являются линейными функциями от вектора варьируемых параметров $u \in R^m$, то условие $X(u) \succeq 0$ эквивалентно выпуклому негладкому ограничению $\varphi(u) = -\lambda_{\min}(X(u)) \leq 0$.

1.4 Заключение к разделу 1

Диссертационная работа посвящена развитию субградиентных методов негладкой оптимизации (на основе второй идеи Шора), техники двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах (на основе третьей идеи Шора), их приложениям в ряде сложных экстремальных задач.

С развитием второй идеи Шора (1969) связаны разделы 2 и 3, в которых описаны новые методы с преобразованием пространства. Во втором разделе это новые модификации метода эллипсоидов, сходящиеся со скоростью геометрической прогрессии, в которой знаменатель зависит лишь от размерности пространства. Они, как и известный метод эллипсоидов Юдина – Немировского – Шора, позволяют находить решение задач с заданной точностью и могут быть использованы для установки границ сложности алгоритмов решения задач математического программирования. В третьем разделе это новые субградиентные методы с преобразованием пространства для минимизации овражных выпуклых функций, в которых преобразование реализует антиовражный прием, близкий к тому, который имеет место в r -алгоритмах. Трудоемкость итерации в этих методах не выше, чем в r -алгоритмах, и она достигается за счет применения одноранговых операторов, которые можно представить с помощью двух последовательных растяжений пространства.

С развитием третьей идеи Шора (1985) связаны разделы 4 и 5. В четвертом разделе это три новых способа построения функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах с булевыми и бинарными переменными, а в пятом разделе – новые свойства самой точной оценки Шора для взвешенного числа устойчивости графа. Эти результаты дополняют технику лагранжевых двойственных оценок новыми алгоритмами, на их основе получено ряд уточненных оценок для квадратичных задач с булевыми и бинарными переменными и для ряда экстремальных задач на графах. Новые свойства наилучшей оценки Шора оказались связаны с подграфом, который известен как p -колесо, и позволили построить новое семейство графов, названное W_p -совершенными графами. Для них наилучшая оценка Шора является точной, и взвешенное число устойчивости графа может быть найдено за полиномиальное время

Приложения разработанных методов в ряде сложных экстремальных задач приведены в разделах 6 и 7. В разделе 6 рассмотрены три квадратичные экстремальные задачи и алгоритмы получения двойственных оценок. В разделе 7 рассмотрены математические модели и методы решения для ряда прикладных экстремальных задач, где существенную роль играют субградиентные методы минимизации негладких функций.

Раздел 2

Модификации метода эллипсоидов

В итерационных методах этого раздела используется внешняя аппроксимация множества решений задачи специальными эллипсоидами, которые можно преобразовать в шар с помощью однократного применения оператора растяжения пространства. В них объем аппроксимирующего эллипсоида от итерации к итерации уменьшается на гарантированную величину, что обеспечивает геометрическую скорость сходимости рассмотренных методов. В подразделе 2.1 рассмотрен приближенный метод эллипсоидов (ПМЭ) и исследована его связь с классическим методом эллипсоидов (МЭ) Юдина–Немировского–Шора [76, 77]. В подразделе 2.2 дано применение ПМЭ к задаче нахождения L_p -нормы переопределенной системы линейных уравнений [78]. В подразделе 2.3 рассмотрен ускоренный метод эллипсоидов (УМЭ), в котором учитывается шаровой слой, вычисленный по информации из предыдущей итерации [74]. Показано, что УМЭ значительно лучше работает с овражными функциями, чем МЭ. В подразделе 2.4 рассмотрено семейство методов эллипсоидов, которые получены в результате пересечения шара и гиперплоскости [66]. Их „предельные“ варианты находят решение специальных задач не более чем за n итераций, где n – размерность пространства переменных.

2.1 Приближенный метод эллипсоидов

Рассматривается приближенный метод эллипсоидов (ПМЭ) и показано, что он асимптотически эквивалентен методу эллипсоидов (МЭ) для задач большой размерности и применим к задачам малой размерности вплоть до одномерных. ПМЭ характеризуется близким к МЭ коэффициентом уменьшения объема для всех размерностей, который близок к оптимальному 0.5 для одномерных задач.

Приближенный метод эллипсоидов (ПМЭ) состоит в следующем. На k -й итерации новый эллипсоид \mathcal{E}_{k+1} объема $\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})$ строится таким образом,

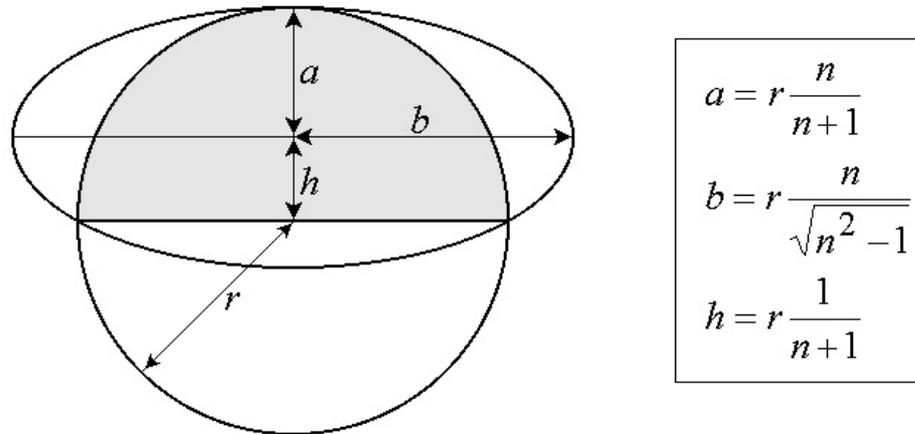


Рис. 2.1. Параметры эллипсоида минимального объема в E^n ($n \geq 2$)

что $\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1}) < \text{vol}(\mathcal{E}_k)$ и коэффициент уменьшения объема

$$Q_n = \frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} = \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}\right) < 1,$$

где n – размерность пространства. ПМЭ имеет следующие свойства:

- (i) коэффициент уменьшения объема Q_n аппроксимируется для больших n такой же асимптотической формулой $Q_n \approx 1 - \frac{1}{2n}$, как и аналогичный коэффициент в методе эллипсоидов (МЭ) Юдина-Немировского-Шора;
- (ii) если $n = 1$, тогда $Q_1 = 2 - \sqrt{2} \approx 0.5858$, и ПМЭ близок к методу дихотомии, который считается аналогом МЭ в одномерном случае.

Метод эллипсоидов (МЭ). Его независимо предложили Д.Б. Юдин и А.С. Немировский в работе [149], а Н.З. Шор – в работе [128]. МЭ использует эллипсоид минимального объема, описанный вокруг полушара радиуса r в E^n ($n \geq 2$). Параметры эллипсоида минимального объема приведены на рис. 2.1, где a – длина меньшей полуоси эллипсоида, b – длина большей полуоси эллипсоида (количество таких полуосей равно $n - 1$), h – расстояние от центра шара до центра эллипсоида в направлении меньшей его полуоси.

Эллипсоид минимального объема имеет объем меньше, чем шар радиуса r , и коэффициент уменьшения объема q_n определяется формулой:

$$q_n = \left(\frac{a}{r}\right) \left(\frac{b}{r}\right)^{n-1} = \frac{n}{n+1} \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}}\right)^{n-1} < \exp\left\{-\frac{1}{2n}\right\} < 1.$$

При больших n коэффициент уменьшения объема хорошо аппроксимируется асимптотической формулой

$$q_n \approx 1 - \frac{1}{2n}.$$

Алгоритмическая реализация МЭ с помощью формул, задающих параметры эллипсоида минимального объема, не может быть автоматически перенесена на одномерный случай. Это связано с тем, что длина большой полуоси эллипсоида минимального объема (см. рис.2.1) определяется по формуле $b = r \frac{n}{\sqrt{n^2-1}}$, которая не имеет смысла при $n = 1$. Для одномерного случая МЭ заменяют на метод дихотомии, и коэффициент уменьшения объема в общем случае задается формулой из [38, стр. 83]. Эта формула имеет вид

$$q(n) = \begin{cases} q_n, & \text{если } n \geq 2, \\ \frac{1}{2}, & \text{если } n = 1, \end{cases}$$

и означает, что использовать одну и ту же алгоритмическую реализацию МЭ не представляется возможным для всех n .

Идея приближенного метода эллипсоидов (ПМЭ). Она состоит в использовании для внешней аппроксимации полшара радиуса r в E^n ($n \geq 2$) некоторого нового эллипсоида взамен эллипсоида минимального объема. Параметры этого эллипсоида приведены на рис. 2.2, где: a' – длина меньшей полуоси нового эллипсоида, b' – длина его большей полуоси (число таких полуосей равно $n - 1$), h' – расстояние от центра шара до центра нового эллипсоида в направлении короткой полуоси.

Объем нового эллипсоида меньше, чем объем шара, и коэффициент уменьшения объема равен

$$Q_n = \left(\frac{a'}{r}\right) \left(\frac{b'}{r}\right)^{n-1} = \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}\right) < 1.$$

Итерация ПМЭ состоит в переходе от текущего эллипсоида, локализуящего решение некоторой задачи, к очередному эллипсоиду локализации ре-

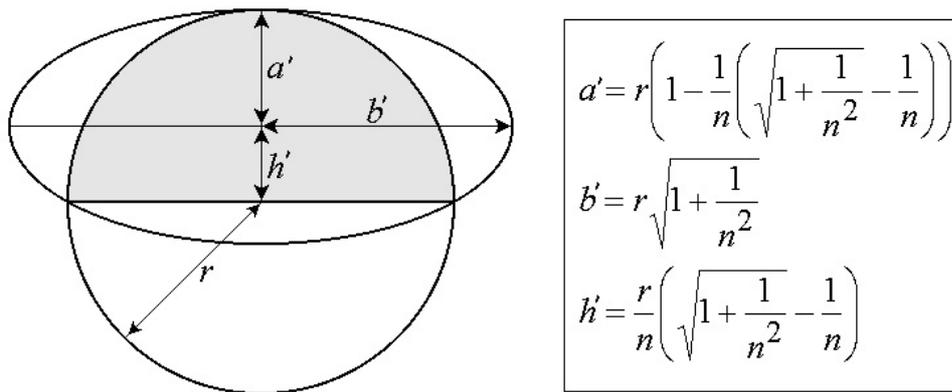


Рис. 2.2. Параметры нового эллипсоида в E^n ($n \geq 2$)

шения, объем которого в Q_n раз меньше, чем объем текущего эллипсоида. Операция, которая требуется для реализации ПМЭ, связана с преобразованием нового эллипсоида в шар. Она позволяет замкнуть цикл вычислений при переходе от одного эллипсоида к другому.

Для преобразования нового эллипсоида в шар достаточно растянуть пространство переменных в направлении короткой полуоси с коэффициентом

$$\alpha = \frac{b'}{a'} = \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{1}{n},$$

что эквивалентно сжатию пространства субградиентов в том же направлении с коэффициентом

$$\beta = \frac{1}{\alpha} = \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}.$$

Это можно сделать с помощью оператора растяжения пространства (см. раздел 1.2, стр. 25), где направление ξ совпадает с направлением короткой полуоси эллипсоида.

Новый эллипсоид может быть использован в одномерном случае. При $n = 1$ имеем

$$b' = r \sqrt{1 + \frac{1}{1^2}} = r\sqrt{2} \quad \text{и} \quad a' = \sqrt{1 + \frac{1}{1^2}} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{1^2}} - \frac{1}{1} \right) r = \sqrt{2} (\sqrt{2} - 1) r,$$

т.е. длины полуосей нового эллипсоида корректно определены (для эллипсоида минимального объема это было не так). Следовательно, ПМЭ можно

применять и в одномерном случае. При этом будет гарантироваться уменьшение объема (более корректно, уменьшение длины интервала, локализирующего решение задачи) в

$$Q_1 = \frac{a'}{r} = \sqrt{2} (\sqrt{2} - 1) = 2 - \sqrt{2} \approx 0.5858.$$

Описание ПМЭ. ПМЭ предназначен для решения следующей задачи:

Пусть векторное поле $g(x)$ (не обязательно непрерывное) определено на E^n , $g(x) \in E^n$, $x \in E^n$ ($n \geq 1$). Требуется найти точку x^* , такую, что $(g(x), x - x^*) \geq 0$ для всех $x \in E^n$. Предполагается, что такая точка x^* существует и $g(x) \neq 0$ для $x \neq x^*$.

К ней могут быть сведены следующие задачи математического программирования: задача безусловной минимизации выпуклой (гладкой или негладкой) функции, задача минимизации выпуклой функции на шаре, общая задача выпуклого программирования, задача о седловой точке выпукло-вогнутых функций [129].

ПМЭ соответствует следующая итеративная процедура.

Инициализация. Зафиксируем стартовую точку $x_0 \in E^n$. Выберем начальный радиус r_0 , такой что $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$. Положим $B_0 := I_n$, где I_n — единичная $(n \times n)$ -матрица.

Пусть на k -й итерации найдены значения $x_k \in E^n$, r_k и $(n \times n)$ -матрица B_k . Переход к $(k + 1)$ -й итерации состоит в выполнении следующей последовательности шагов.

Шаг 1. Вычислим $g(x_k)$. Если $g(x_k) = 0$, тогда останов: x_k — решение. Иначе перейдем к шагу 2.

Шаг 2. Определим

$$\xi_k := \frac{B_k^T g(x_k)}{\|B_k^T g(x_k)\|}.$$

Шаг 3. Вычислим следующую точку

$$x_{k+1} := x_k - h_k B_k \xi_k, \quad \text{где} \quad h_k = \frac{r_k}{n} \beta, \quad \beta = \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}.$$

Шаг 4. Вычислим

$$B_{k+1} := B_k R_\beta(\xi_k) \quad \text{и} \quad r_{k+1} := r_k \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}}.$$

Шаг 5. Перейдем к $(k + 1)$ -й итерации со значениями x_{k+1} , r_{k+1} и B_{k+1} .

Дадим краткие комментарии к k -й итерации ПМЭ. Пусть $X = E^n$ – исходное пространство переменных. Тогда шаг 2 связан с вычислением направления короткой полуоси нового эллипсоида в преобразованном линейным оператором $A_k = B_k^{-1}$ пространстве переменных $Y_k = A_k X$. Это же направление используется для очередного растяжения пространства, которое на шаге 4 реализовано пересчетом матрицы B_{k+1} , соответствующей оператору обратного преобразования пространства. Шаг 3 осуществляет переход в центр нового эллипсоида в текущем преобразованном пространстве переменных Y_k , который в очередном преобразованном пространстве переменных $Y_{k+1} = A_{k+1} X$ (здесь $A_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$) будет шаром радиуса r_{k+1} , который вычисляется на шаге 4. В результате выполнения шагов 1–4 все подготовлено к очередной $(k + 1)$ -й итерации, после чего эта же процедура повторяется в очередном преобразованном пространстве переменных $Y_{k+1} = A_{k+1} X$.

Для ПМЭ справедлива следующая теорема.

Теорема 2.1 Пусть $A_k = B_k^{-1}$. Тогда генерируемая ПМЭ последовательность точек $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ удовлетворяет неравенству

$$\|A_k(x_k - x^*)\| \leq r_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Выполнение неравенства (2.1) следует из изложенного выше способа построения ПМЭ. С другой стороны, теорему 2.1 можно доказать с позиций того, что ПМЭ является частным случаем алгоритмов с растяжением пространства с конкретным выбором его параметров. Приведем доказательство теоремы по типу того, как для МЭ это было сделано Н.З. Шором [128].

Прежде чем перейти к доказательству, приведем соотношения для оператора растяжения пространства

$$R_\alpha(\xi) = I_n + (\alpha - 1)\xi\xi^T, \quad \xi \in E^n, \quad \|\xi\| = 1, \quad (2.2)$$

которые использованы при доказательствах этой и последующей за ней теорем. Это будут следующие соотношения:

$$R_\alpha^T(\xi)R_\alpha(\xi) = R_{\alpha^2}(\xi), \quad (2.3)$$

$$\det R_\alpha(\xi) = \alpha, \quad (2.4)$$

которые следуют из свойств оператора растяжения пространства (2.2), см. [130], стр. 68–69. Кроме того, будем использовать соотношение

$$A_{k+1} = R_\alpha(\xi_k)A_k, \quad (2.5)$$

которое, учитывая, что $\alpha = \frac{1}{\beta}$, следует из цепочки равенств

$$A_{k+1} = B_{k+1}^{-1} = (B_k R_\beta(\xi_k))^{-1} = R_\beta^{-1}(\xi_k)B_k^{-1} = R_{\frac{1}{\beta}}(\xi_k)A_k = R_\alpha(\xi_k)A_k.$$

Доказательство. Доказательство теоремы 2.1 проведем индукцией по k . Для $k = 0$ неравенство (2.1) переходит в $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$ и выполняется по предположению. Предположим, что (2.1) выполняется для $k = \bar{k}$. Докажем его выполнение для $k = \bar{k} + 1$.

Учитывая соотношение (2.3) и то, что из (2.5) следует $A_{\bar{k}+1} = R_\alpha(\xi_{\bar{k}})A_{\bar{k}}$, имеем цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \|A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 &= (A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*), A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) = \\ &= (R_\alpha(\xi_{\bar{k}})A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), R_\alpha(\xi_{\bar{k}})A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), R_\alpha^T(\xi_{\bar{k}})R_\alpha(\xi_{\bar{k}})A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), R_{\alpha^2}(\xi_{\bar{k}})A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), (I + (\alpha^2 - 1)\xi_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}^T)A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)) + (\alpha^2 - 1)(\xi_{\bar{k}}, A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*))^2 = \\ &= \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 + (\alpha^2 - 1)(\xi_{\bar{k}}, A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*))^2, \end{aligned}$$

которую запишем в виде соотношения:

$$\|A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 = \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 + (\alpha^2 - 1)(\xi_{\bar{k}}, A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*))^2. \quad (2.6)$$

Далее, расшифруем оба слагаемых в правой части (2.6), для чего используем соотношение

$$A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*) = A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}, \quad (2.7)$$

которое, учитывая, что $A_{\bar{k}} = B_{\bar{k}}^{-1}$ и очередная точка в ПМЭ вычисляется по формуле из шага 3, следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned} A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*) &= A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - h_{\bar{k}}B_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}} - x^*) = \\ A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}A_{\bar{k}}B_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}} &= A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое в правой части (2.6) можно записать в виде равенства:

$$\|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 = \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2, \quad (2.8)$$

которое с учетом (2.7) и того, что $\|\xi_{\bar{k}}\| = 1$, следует из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 &= \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}\|^2 = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}, A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}) = \\ &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)) - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2(\xi_{\bar{k}}, \xi_{\bar{k}}) = \\ &= \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2\|\xi_{\bar{k}}\|^2 = \\ &= \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2. \end{aligned}$$

Учитывая соотношение (2.7), для квадрата скалярного произведения во втором слагаемом правой части (2.8) имеем следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 &= (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*) - h_{\bar{k}}\xi_{\bar{k}}, \xi_{\bar{k}})^2 = \\ &= ((A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) - h_{\bar{k}}(\xi_{\bar{k}}, \xi_{\bar{k}}))^2 = ((A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) - h_{\bar{k}}\|\xi_{\bar{k}}\|)^2 = \\ &= ((A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) - h_{\bar{k}})^2 = (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2. \end{aligned}$$

Следовательно, квадрат указанного скалярного произведения можно записать в виде:

$$(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 = (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2. \quad (2.9)$$

Подставляя (2.8) и (2.9) в (2.6) имеем

$$\begin{aligned}
& \|A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 = \tag{2.10} \\
& \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 + (\alpha^2 - 1)(\xi_{\bar{k}}, A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}+1} - x^*))^2 = \\
& \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2 + \\
& (\alpha^2 - 1) \left((A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 - 2h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + h_{\bar{k}}^2 \right) = \\
& \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - 2\alpha^2 h_{\bar{k}}(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) + \\
& (\alpha^2 - 1)(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})^2 + \alpha^2 h_{\bar{k}}^2 = \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - \\
& (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) (2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1)(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})) + \alpha^2 h_{\bar{k}}^2.
\end{aligned}$$

Далее, для оценки знака произведения

$$(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) (2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1)(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})),$$

входящего в правую часть соотношения (2.10), оценим знаки обоих его сомножителей. Первый сомножитель будет неотрицательным. Учитывая, что $(x - x^*, g(x)) \geq 0$ для всех $x \in E^n$, его легко оценить следующим образом:

$$\begin{aligned}
(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) &= \left(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \frac{B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})}{\|B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})\|} \right) = \\
& \frac{1}{\|B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})\|} (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})) = \\
& \frac{1}{\|B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})\|} (B_{\bar{k}} A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), g(x_{\bar{k}})) = \\
& \frac{1}{\|B_{\bar{k}}^T g(x_{\bar{k}})\|} (x_{\bar{k}} - x^*, g(x_{\bar{k}})) \geq 0.
\end{aligned}$$

Учитывая, что

$$0 \leq (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) \leq \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\| \leq r_{\bar{k}}$$

и

$$\alpha = \frac{1}{\beta} = \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{1}{n},$$

для второго сомножителя имеем:

$$\begin{aligned}
& 2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1) (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) \geq \\
& 2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1) r_{\bar{k}} = 2\alpha^2 \frac{r_{\bar{k}}}{n} \beta - (\alpha^2 - 1) r_{\bar{k}} = \\
& \left(\alpha \beta \frac{2\alpha}{n} - (\alpha^2 - 1) \right) r_{\bar{k}} = \left(\frac{2\alpha}{n} - (\alpha^2 - 1) \right) r_{\bar{k}} = \\
& \left(\frac{2}{n} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{1}{n} \right) - \left(\left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{1}{n} \right)^2 - 1 \right) \right) r_{\bar{k}} = \\
& \left(\frac{2}{n} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{2}{n^2} - \left(1 + \frac{1}{n^2} + \frac{2}{n} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{1}{n^2} - 1 \right) \right) r_{\bar{k}} = \\
& \left(\frac{2}{n} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} + \frac{2}{n^2} - \frac{2}{n} \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{2}{n^2} \right) r_{\bar{k}} = 0.
\end{aligned}$$

Здесь учтено, что $h_{\bar{k}} = \frac{r_{\bar{k}}}{n} \beta$ и $\alpha \beta = 1$.

Из неотрицательности обоих сомножителей следует, что

$$(A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) (2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1) (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})) \geq 0. \quad (2.11)$$

Далее, учитывая (2.11) и то, что $\|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\| \leq r_{\bar{k}}$, соотношение (2.10) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
& \|A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 = \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 - \\
& (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}}) (2\alpha^2 h_{\bar{k}} - (\alpha^2 - 1) (A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*), \xi_{\bar{k}})) + \alpha^2 h_{\bar{k}}^2 \leq \\
& \|A_{\bar{k}}(x_{\bar{k}} - x^*)\|^2 + \alpha^2 h_{\bar{k}}^2 \leq r_{\bar{k}}^2 + \alpha^2 \left(\frac{r_{\bar{k}}}{n} \beta \right)^2 = \\
& r_{\bar{k}}^2 + (\alpha \beta)^2 \frac{r_{\bar{k}}^2}{n^2} = r_{\bar{k}}^2 + \frac{r_{\bar{k}}^2}{n^2} = r_{\bar{k}}^2 \left(1 + \frac{1}{n^2} \right),
\end{aligned}$$

откуда имеем неравенство

$$\|A_{\bar{k}+1}(x_{\bar{k}+1} - x^*)\|^2 \leq r_{\bar{k}}^2 \left(1 + \frac{1}{n^2} \right),$$

из которого следует справедливость (2.1). Теорема доказана. \square .

Множество точек x , удовлетворяющих неравенству $\|A_k(x_k - x)\| \leq r_k$, является эллипсоидом \mathcal{E}_k , содержащим точку x^* . Эллипсоид \mathcal{E}_k имеет объем

$$\text{vol}(\mathcal{E}_k) = \frac{v_0 r_k^n}{\det A_k}, \quad (2.12)$$

где v_0 – объем единичного n -мерного шара, $\det A_k$ – определитель матрицы A_k .

Следовательно, скорость сходимости ПМЭ будет определяться отношением объема эллипсоида \mathcal{E}_{k+1} , локализирующего x^* на $(k+1)$ -й итерации, к объему эллипсоида \mathcal{E}_k , локализирующего x^* на k -й итерации. Скорость сходимости ПМЭ определяет следующая теорема.

Теорема 2.2 *Для всех итераций ПМЭ коэффициент уменьшения объема эллипсоида, локализирующего x^* , есть величина постоянная и равная*

$$Q_n = \frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} = \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}\right) < 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

При $n \geq 2$ коэффициент Q_n оценивается следующим образом:

$$Q_n < \exp \left\{ -\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} \right\} < 1.$$

Доказательство. Для A_{k+1} , согласно (2.5), имеем $A_{k+1} = R_\alpha(\xi_k)A_k$. Следовательно, для определителей этих матриц, учитывая их невырожденность, справедливо $\det A_{k+1} = \det R_\alpha(\xi_k) \det A_k$. Учитывая формулы (2.12) и (2.5), найдем коэффициент уменьшения объема

$$\begin{aligned} Q_n &= \frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} = \frac{v_0 r_{k+1}^n \det A_k}{v_0 r_k^n \det A_{k+1}} = \left(\frac{r_{k+1}}{r_k}\right)^n \frac{\det A_k}{\det R_\alpha(\xi_k) \det A_k} = \\ &= \left(\frac{r_{k+1}}{r_k}\right)^n \frac{1}{\alpha} = \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}}\right)^n \beta = \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n}\right), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Для оценки коэффициента Q_n воспользуемся неравенствами

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} &< \exp \left\{ \frac{1}{2n} \right\}, \\ \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n} &< 1 + \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{n} < \exp \left\{ \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{n} \right\}. \end{aligned}$$

Тогда

$$Q_n < \exp \left\{ \frac{1}{2n} \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{n} \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} \right\},$$

откуда, при $n \geq 2$ (учитывая, что показатель экспоненты – отрицателен), имеем

$$Q_n < \exp \left\{ -\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} \right\} < 1.$$

Теорема доказана. \square .

Сравнение скорости сходимости ПМЭ и МЭ. Из теоремы 2.2 вытекают следующие свойства ПМЭ:

- (i) при больших n он имеет такую же асимптотическую скорость сходимости, как и известный МЭ. Это обусловлено тем, что для больших n коэффициент Q_n аппроксимируется асимптотической формулой

$$Q_n \approx 1 - \frac{1}{2n}.$$

- (ii) он может быть применен в одномерном случае, где МЭ заменяется методом дихотомии. Если $n = 1$, тогда коэффициент Q_n равен

$$Q_1 = 2 - \sqrt{2} \approx 0.5858$$

и близок к 0.5, что обеспечивает метод дихотомии.

Однако, эти свойства характеризуют скорость сходимости ПМЭ только для предельных случаев n . В общем случае при $n \geq 2$, имеем $Q_n > q_n$. Поэтому практический интерес представляет скорость сходимости ПМЭ в диапазоне $n \sim 10$, где использование МЭ достаточно эффективно. О скорости сходимости ПМЭ по сравнению с МЭ в этом диапазоне n можно судить из таблицы 2.1, где для значений n ($2 \leq n \leq 10$) приведено число итераций, которое потребуется обоим методам, чтобы найти минимум выпуклой функции с относительной точностью, равной 10^{-10} .

Здесь K_1 – число итераций для МЭ и K_2 – число итераций для ПМЭ. Они вычислены по формулам:

$$K_1 = \frac{-10n \ln 10}{\ln q_n} + 1 \quad \text{и} \quad K_2 = \frac{-10n \ln 10}{\ln Q_n} + 1,$$

что соответствует их вычислению из условий:

$$(q_n)^{K_1} \leq 10^{-10n} \quad \text{и} \quad (Q_n)^{K_2} \leq 10^{-10n}.$$

Таблица 2.1. Сравнение МЭ и ПМЭ

n	q_n	Q_n	Q_n/q_n	K_1	K_2
2	0.7698004	0.7725425	1.0035621	177	179
3	0.8437500	0.8441633	1.0004898	407	408
4	0.8813189	0.8814234	1.0001186	730	730
5	0.9042245	0.9042600	1.0000392	1144	1144
6	0.9196855	0.9197001	1.0000159	1651	1651
7	0.9308347	0.9308416	1.0000074	2249	2250
8	0.9392592	0.9392628	1.0000038	2940	2940
9	0.9458508	0.9458528	1.0000021	3723	3723
10	0.9511498	0.9511510	1.0000012	4598	4598

Такое число итераций для обоих методов гарантирует локализацию x^* в эллипсоиде, объем которого в 10^{10n} раз меньше, чем объем исходного шара, локализующего x^* . Так, например, при безусловной минимизации выпуклой функции $f(x)$ такая точность позволяет на десять порядков улучшить отклонение найденного рекордного значения $f(x)$ от ее оптимального значения.

Из таблицы 2.1 видно, что при всех n ($2 \leq n \leq 10$) число итераций ПМЭ практически такое же, как и число итераций МЭ. В таблице 2.1 также приведены коэффициенты уменьшения объема на одной итерации: q_n – для МЭ и Q_n – для ПМЭ. Чтобы облегчить их сравнение в отдельной колонке дано отношение Q_n/q_n , которое свидетельствует о незначительном отличии коэффициентов уменьшения объема в МЭ и ПМЭ для всех n из указанного диапазона.

Приведенные в таблице 2.1 результаты подтверждают, что при небольших размерах $n \sim 10$ все равно, какой из двух методов использовать. Учитывая, что ПМЭ применим и в одномерном случае, то использовать его целесообразнее, чем МЭ, если задача может вырождаться в одномерную.

2.2 Метод нахождения L_p -решения системы линейных уравнений

Рассматривается задача нахождения L_p -решений переопределенной системы линейных алгебраических уравнений при интервальных ограничениях на компоненты решения. Предложен метод для нахождения L_p -решений, основанный на использовании приближенного метода эллипсоидов. Показано, что этот метод находит L_p -решение системы линейных алгебраических уравнений за конечное число итераций, зависящее от числа неизвестных компонент в L_p -решении.

Постановка задачи. Пусть имеется следующая система линейных алгебраических уравнений:

$$Ax \approx b, \quad (2.13)$$

$$l \leq x \leq u, \quad (2.14)$$

где A – $n \times m$ вещественная матрица; b – m -мерный вещественный вектор; l , u – n -мерные векторы, такие, что для всех $i = 1, \dots, n$ $u_i \geq l_i$; x – n -мерный вектор неизвестных параметров, $m > n$. Требуется найти такой вектор x^* , который удовлетворяет ограничениям (2.14) и «наилучшим образом» (обозначено знаком « \approx ») выполняет соотношение (2.13).

Понятие «наилучшим образом» будем понимать как наилучшее решение системы (2.13)–(2.14) в так называемой L_p -норме, т. е. когда норма вектора невязок $y = Ax - b = (y_1, \dots, y_m)^T$ определена следующим образом: $\|y\|_p = \left(\sum_{i=1}^m |y_i|^p \right)^{1/p}$, где $p \geq 1$. Случай $p = \infty$ определяется как $\|y\|_\infty = \max_{i=1, \dots, m} |y_i|$. Случай $p = 2$ соответствует стандартной евклидовой норме.

Подобные задачи часто встречаются в самых разных областях прикладной математики, например: при обработке результатов наблюдений, построении и анализе различного рода моделей (физических, биологических, экономических, социальных и др.), при поиске компромиссных решений в моделях с противоречивыми данными и т. д.

Нахождению наилучшего L_p -решения системы (2.13)–(2.14) соответствует следующая задача выпуклого программирования:

$$\min_{x \in R^n} \left\{ f_p(x) = \|Ax - b\|_p \right\} \quad (2.15)$$

при ограничениях:

$$l \leq x \leq u, \quad (2.16)$$

где p – скалярный параметр, такой что $p \geq 1$, который гарантирует выпуклость функции $f_p(x)$. Пусть x_p^* – решение задачи (2.15)–(2.16), необязательно единственное.

О методах решения задачи (2.15)–(2.16). В частных случаях, т. е. при некоторых конкретных значениях p , задача может быть решена достаточно эффективно посредством стандартных численных процедур оптимизации [43, 44]. Так, например, когда $p = 1$, $p = +\infty$, задача (2.15)–(2.16) может быть сведена к задаче линейного программирования и решена симплекс-методом, либо методом внутренних точек [12, 13]. Когда $p = 2$, то она может быть сведена к задаче квадратичного программирования и решена посредством численных методов, например, из [29, 50].

В общем случае, т. е. при произвольном значении параметра p ($p \geq 1$), задача (2.15)–(2.16) является задачей выпуклого программирования с негладкой целевой функцией и простейшими (интервальными) ограничениях на переменные. Поэтому для ее решения требуется разработка численных методов, основанных на алгоритмах недифференцируемой оптимизации. Так, например, такой метод можно построить на основе r -алгоритмов [130], как эффективного средства решения задач негладкой оптимизации. Подобная методика применялась в [68] и базировалась на использовании модификации $r(\alpha)$ -алгоритма.

На практике часто требуется локализовать решение x_p^* с определенной (иногда достаточно «грубой») точностью. Семейство r -алгоритмов таким свойством не обладает. Построить метод для решения задачи (2.15)–(2.16) с возможностью оценки области локализации x_p^* на каждой итерации этого метода легко, если в качестве алгоритма негладкой оптимизации использовать

приближенный метод эллипсоидов (ПМЭ) из раздела 2.1. Такой метод будет применим и при решении одномерных задач вида (2.15)–(2.16).

Чтобы применить ПМЭ для решения задачи условной оптимизации требуется: во первых – определить градиентное поле $g(x)$ и во-вторых – выбрать начальный радиус области локализации оптимального решения. Удовлетворить эти требования для задачи (2.15)–(2.16) не представляет особых проблем. Так, первую часть этих требований можно удовлетворить, используя следующую лемму.

Лемма 2.1 Пусть величина $t^* = \max\{t_{i^*}, t_{j^*}\}$, где $t_{i^*} = \max_{i=1, \dots, n} \{x_i - u_i\}$ и $t_{j^*} = \max_{j=1, \dots, n} \{l_j - x_j\}$. Обозначим: i^* – значение i ($1 \leq i \leq n$), на котором достигается t_{i^*} ; j^* – значение j ($1 \leq j \leq n$), на котором достигается t_{j^*} ; $\partial f_p(x)$ – субградиент функции $f_p(x)$; e_k – k -й орт в E^n , $1 \leq k \leq n$.

Тогда, вектор

$$g_p(x) = \begin{cases} \partial f_p(x), & \text{если } t^* \leq 0, \\ e_{i^*}, & \text{если } t^* > 0 \text{ и } t^* > t_{i^*}, \\ -e_{j^*}, & \text{если } t^* > 0 \text{ и } t^* \leq t_{j^*}, \end{cases}$$

удовлетворяет свойству

$$(g_p(x), x - x_p^*) \geq 0 \quad \text{для всех } x \in E^n. \quad (2.17)$$

Доказательство леммы 2.1 приводить не будем. Отметим лишь, что она имеет следующий содержательный смысл. Если точка x находится внутри допустимой области, заданной ограничениями (2.16), то в качестве $g_p(x)$ выбирается субградиент функции $f_p(x)$ в этой точке, а если точка находится вне допустимой области, то выбирается субградиент к максимально нарушенному ограничению вида (2.16). Учитывая выпуклость функции и выпуклость ограничений (2.16), очевидно, что такой выбор $g_p(x)$ гарантирует выполнение свойства (2.17).

В соответствии с правилом вычисления $g_p(x)$ в лемме 2.1 построим формулу для вычисления «обобщенного» значения функции задачи (2.15)–(2.16):

$$F_p(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{если } t^* > 0; \\ f_p(x), & \text{если } t^* \leq 0. \end{cases}$$

Значение $F_p(x)$ будем использовать при построении критерия останова в методе нахождения x_p^* .

Вторую часть требований, связанную с априорной информацией о локализации x_p^* , легко обеспечить, выбрав в качестве центра шара центр параллелепипеда, заданного интервальными ограничениями на переменные (2.16), и установив радиус шара таким, чтобы этот шар содержал параллелепипед и имел минимальный объем. Это обеспечивает следующая лемма.

Лемма 2.2 Пусть

$$x_0 = \left\{ \frac{u_1 + l_1}{2}, \dots, \frac{u_n + l_n}{2} \right\} \quad \text{и} \quad r_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (u_i - l_i)^2}.$$

Тогда параллелепипед $P(x) = \{x : l_i \leq x_i \leq u_i, \quad i = 1, \dots, n\}$ содержится в шаре $S(x_0, r_0) = \{x : \|x - x_0\| \leq r_0\}$.

Заметим, что это самый простой и очевидный выбор x_0 и r_0 для модификации метода эллипсоидов. Более сложный выбор можно осуществить, описав вокруг параллелепипеда эллипсоид минимального объема. Однако, в этом случае усложняется обоснование сходимости метода, если некоторые переменные фиксированы (т.е. $l_i = u_i$ для некоторых i). Дело в том, что использование эллипсоида минимального объема приводит к проектированию на орты, соответствующие фиксированным переменным, и обратная матрица, задающая этот эллипсоид, является вырожденной. Такая схема выбора x_0 и r_0 возможна, но мы ее рассматривать не будем. Заметим лишь, что она имеет преимущество по сравнению с леммой 2, так как приводит к уменьшению размерности решаемой задачи.

Учитывая вышеизложенное, метод для нахождения x_p^* примет следующий вид. Здесь p будем считать входным параметром метода ($p \geq 1$), а ε_f определяет точность, с которой требуется найти значение $f_p^* = f_p(x_p^*)$.

Инициализация. Положим стартовую точку $x_0 = (u + l)/2$ и начальный радиус $r_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (u_i - l_i)^2}$. Вычислим β по формуле

$$\beta = \left(\sqrt{1 + \frac{1}{n^2}} - \frac{1}{n} \right).$$

Введем в рассмотрение матрицу B размера $n \times n$ и положим $B_0 := I_n$, где I_n – единичная матрица размером $n \times n$. Перейдем к первой итерации со значениями x_0 , r_0 и B_0 .

Пусть на k -й итерации найдены значения $x_k \in E^n$, r_k , B_k . Переход к $(k+1)$ -й итерации состоит в выполнении такой последовательности действий.

Шаг 1. Вычислим $F_p(x_k)$. Если $F_p(x_k) = 0$, то «ОСТАНОВ» $x_p^* = x_k$. Иначе вычислим $g_p(x_k)$. Если $F_p(x_k) < +\infty$ и $\|B_k^T g_p(x_k)\| r_k \leq \varepsilon_f$, то «ОСТАНОВ» $x_p^* = x_k$. Иначе переходим к шагу 2.

Шаг 2. Положим

$$\xi_k := \frac{B_k^T g_p(x_k)}{\|B_k^T g_p(x_k)\|}.$$

Шаг 3. Вычислим очередную точку

$$x_{k+1} := x_k - h_k B_k \xi_k, \quad \text{где } h_k = \frac{r_k}{n} \beta.$$

Шаг 4. Вычислим

$$B_{k+1} := B_k R_\beta(\xi_k) \quad \text{и} \quad r_{k+1} := r_k \sqrt{1 + \frac{1}{n^2}},$$

где $R_\beta(\xi) = I_n + (\beta - 1)\xi\xi^T$.

Шаг 5. Переходим к $(k+1)$ -й итерации со значениями x_{k+1} , r_{k+1} , B_{k+1} .

Факт сходимости вышеприведенного метода обеспечивается следующей теоремой.

Теорема 2.3 Если не сработал ни один из критериев останова (см. шаг 1), то последовательность точек $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ удовлетворяет неравенству

$$\|B_k^{-1}(x_k - x_p^*)\| \leq r_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Коэффициент q уменьшения объема эллипсоида, локализирующего x_p^* , на каждой итерации k есть величина постоянная и равная

$$q = \frac{\text{vol}(\mathcal{E}_{k+1})}{\text{vol}(\mathcal{E}_k)} = \left(1 + \frac{1}{n^2}\right)^{n/2} \times \beta < \exp\left\{-\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2}\right\} < 1.$$

Ее доказательство следует из теорем 2.1 и 2.2 для ПМЭ.

Из теоремы 2.3 следует: для того, чтобы уменьшить объем эллипсоида, локализирующего x_p^* , в 10 раз, требуется выполнить K итераций, где

$$K = -\frac{\ln 10}{\ln q} \approx (2 \ln 10)n \approx 4.6n.$$

Так, например, для задачи (2.15)–(2.16) такое уменьшение объема означает следующее: чтобы на порядок улучшить отклонение найденного рекордного значения минимизируемой функции $f_p(x)$ от ее оптимального значения f_p^* , потребуется сделать $4.6n^2$ итераций. Если в задаче (2.15)–(2.16) число переменных $n \leq 10$, то максимальное количество итераций, чтобы найти f_p^* с относительной точностью равной 10^{-10} , легко оценить из таблицы 2.1. Для указанного диапазона n оно составляет

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10
itn	179	408	730	1144	1651	2250	2940	3723	4598

и, следовательно, разработанный метод можно успешно применять для нахождения x_p^* , если число переменных $n \leq 10$. Значение m не влияет на скорость сходимости метода. От него зависит трудоемкость вычисления значения функции $f_p(x)$ и ее субградиента $\partial f_p(x)$, что при $m \sim 1000$ будет вносить более весомый вклад в трудоемкость метода, чем алгоритмические операции (шаги 2–4).

В заключение отметим, что вышеприведенный метод свободен от параметров регулировки шага, настройка всех его параметров делается автоматически. Кроме того, за конечное число итераций он гарантирует нахождение x_p^* с требуемой точностью (на каждой итерации можно указать область локализации точки минимума).

2.3 Ускоренный метод эллипсоидов

Рассматривается ускоренный метод эллипсоидов (УМЭ), основанный на использовании эллипсоида минимального объема, содержащего шаровой слой. На текущей итерации УМЭ используется информация об отсекающей гиперплоскости из предыдущей итерации и, если эта информация позволяет уменьшить объем аппроксимирующего эллипсоида, то такое уменьшение реализуется, если же нет, то реализуется шаг известного метода эллипсоидов (МЭ). Приведены результаты численных экспериментов, которые показывают, что при минимизации овражных выпуклых функций скорость сходимости УМЭ оказывается в несколько раз лучше, чем скорость сходимости МЭ.

В работах [131, 182, 209] построены модификации МЭ с более сильными коэффициентами уменьшения объема на шаге. Для этого использовались оптимальные эллипсоиды, описанные вокруг сложных выпуклых тел (сегмент, шаровой слой и s -пирамида). Итерация этих методов связана с переходом в центр минимального по объему эллипсоида, описанного вокруг одного из этих выпуклых тел. Эти модификации МЭ, как правило, характеризовались коэффициентами уменьшения объема, достаточно близкими к коэффициенту уменьшения объема q_n в МЭ. В результате усилия, которые были затрачены на построение локализирующих тел, не окупались затем достаточным уменьшением объема.

На итерации метода из [131] для построения шарового слоя использовалась информация о нескольких отсекающих гиперплоскостях, которые вычислялись на этой итерации. В то же время «забывалась» информация об отсекающей гиперплоскости с предыдущей итерации. Здесь будет построен ускоренный метод эллипсоидов (УМЭ), для которого будем использовать информацию о вычисленной ранее гиперплоскости.

Сделаем это следующим образом. Если на текущей итерации можно построить шаровой слой (в направлении вычисленной на этой итерации отсекающей гиперплоскости), используя информацию о предыдущей отсекающей

гиперплоскости, то мы будем переходить в центр минимального по объему эллипсоида, описанного вокруг этого шарового слоя. Если же это не удастся, то будем переходить в центр минимального по объему эллипсоида, содержащего полушар, как в МЭ. Понятно, что для такого УМЭ можно гарантировать скорость сходимости не хуже, чем скорость сходимости МЭ. В том же случае, когда на итерациях часто получаем «хорошие» шаровые слои, то скорость сходимости УМЭ будет значительно лучше, чем у МЭ. При этом на каждой итерации УМЭ будет вычисляться только одна отсекающая гиперплоскость, как и в МЭ.

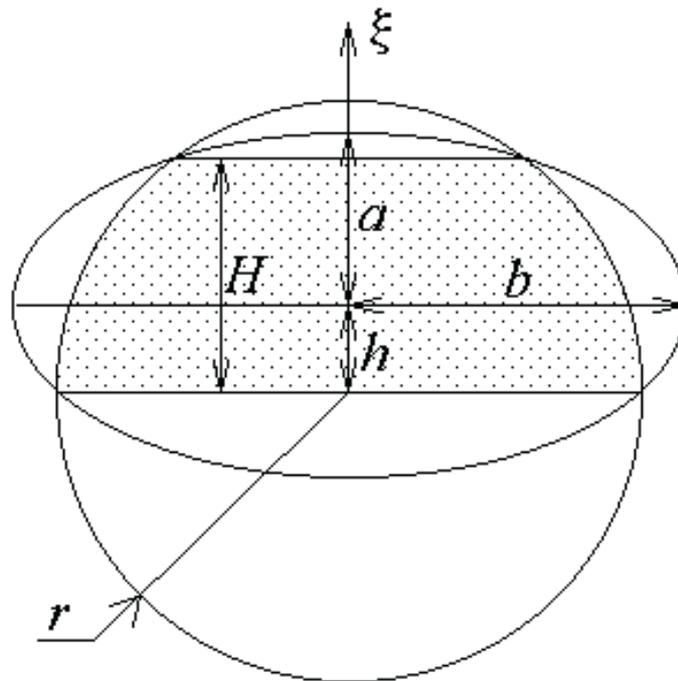


Рис. 2.3. Параметры эллипсоида, содержащего шаровой слой

В основу УМЭ положен эллипсоид минимального объема, содержащий шаровой слой (см. рис. 2.3), который получен в результате пересечения шара радиуса r с центром в некоторой точке $x_k \in E^n$ и множества вида

$$PU(x_k, \xi, H) = \left\{ x : 0 \leq (x - x_k, \xi) \leq H \right\},$$

где $\xi \in E^n$ – вектор единичной длины, H – скаляр такой, что $0 < H \leq r$.

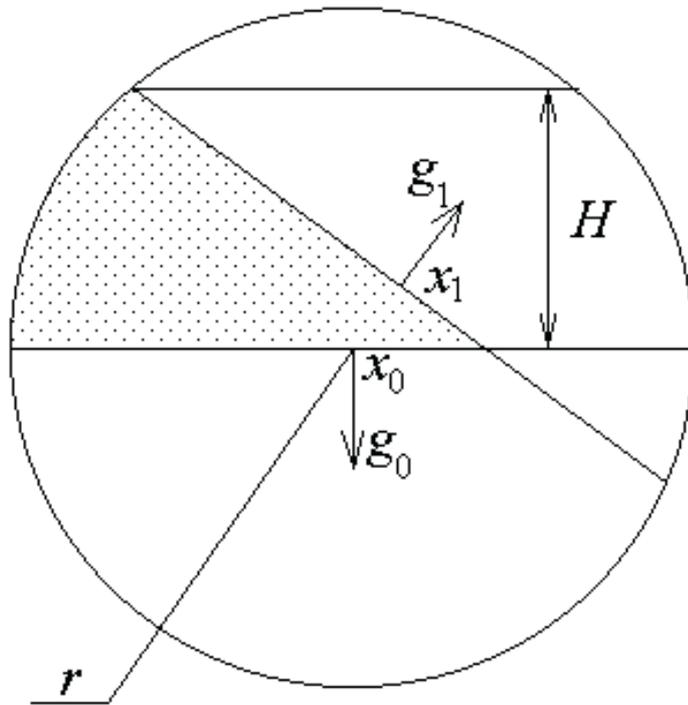


Рис. 2.4. Обратное отсечение (параметры)

Параметры эллипсоида минимального объема, содержащего указанный шаровой слой, определяются по следующим формулам (см. [182]):

$$h(r, H) = \frac{1}{2} \left(H - \sqrt{\frac{n-1}{n+1} H^2 + \left(\frac{2r^2 - H^2}{(n+1)H} \right)^2} + \frac{2r^2 - H^2}{(n+1)H} \right), \quad (2.18)$$

$$\beta(r, H) = \sqrt{\sqrt{\frac{n-1}{n+1} + \left(\frac{2r^2 - H^2}{(n+1)H^2} \right)^2} - \frac{2r^2 - H^2}{(n+1)H^2}}, \quad (2.19)$$

$$b(r, H) = \sqrt{r^2 - \left(\frac{H}{2} \right)^2 \frac{(1 - \beta^2(r, H))^2}{\beta^2(r, H)}}. \quad (2.20)$$

Здесь $b(r, H)$ – длина большой полуоси эллипсоида, $h(r, H)$ – расстояние от центра шара до центра эллипсоида в направлении ξ , которое совпадает с направлением меньшей полуоси, $\beta(r, H)$ – коэффициент, задающий отношение длины меньшей полуоси к длине большой полуоси. Эти параметры однозначно определяют эллипсоид и вместе со способом вычисления H их достаточно для реализации модификации МЭ. Для нахождения параметра H (см. рис. 2.4) на каждой итерации будем использовать формулы из [182].

УМЭ рассчитан на ту же постановку задачи, как и МЭ.

Пусть на E^n задано векторное поле $g(x)$, не обязательно непрерывное, $g(x) \in E^n$, $x \in E^n$. Требуется найти такую точку x^* , что $(g(x), x - x^*) \geq 0$ при всех $x \in E^n$. Предполагается, что $g(x) \neq 0$ при $x \neq x^*$.

Кроме того, задана априорная информация о локализации x^* , т.е. $x^* \in S(x_0, r_0)$, где $S(x_0, r_0)$ – шар радиуса r_0 с центром в точке x_0 .

УМЭ соответствует следующая итеративная процедура.

Инициализация. Фиксируем стартовую точку $x_0 \in E^n$ и начальный радиус r_0 , такие, что $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$.

Введем в рассмотрение матрицу B размера $n \times n$ и положим $B_0 := I_n$.

Первая итерация требует выполнения следующей последовательности действий.

Шаг 1.1. Вычислим $g(x_0)$. Если $g(x_0) = 0$, то ОСТАНОВ « $x_0 = x^*$ ». Иначе переходим к шагу 1.2.

Шаг 1.2. Положим

$$\xi_0 := \frac{g(x_0)}{\|g(x_0)\|}, \quad h_0 = \frac{1}{n+1}r_0, \quad \beta_0 = \sqrt{\frac{n-1}{n+1}}.$$

Шаг 1.3. Вычислим очередную точку

$$x_1 := x_0 - h_0\xi_0.$$

Шаг 1.4. Вычислим

$$B_1 := B_0 R_{\beta_0}(\xi_0) \quad \text{и} \quad r_1 = r_0 \frac{n}{\sqrt{n^2 - 1}}.$$

Шаг 1.5. Переходим к очередной итерации со значениями x_1 , B_1 , r_1 , ξ_0 , h_0 , β_0 .

Пусть на k -й итерации найдены значения $x_k \in E^n$, B_k , r_k , ξ_{k-1} , h_{k-1} , β_{k-1} . Переход к $(k+1)$ -й итерации состоит в выполнении следующей последовательности действий.

Шаг k.1. Вычислим $g(x_k)$. Если $g(x_k) = 0$, то ОСТАНОВ « $x_k = x^*$ ». Иначе переходим к шагу k.2.

Шаг к.2. Положим

$$\xi_k := \frac{B_k^T g(x_k)}{\|B_k^T g(x_k)\|}.$$

Шаг к.3. Если $h_{k-1}/\beta_{k-1} < -r_k(\xi_k, \xi_{k-1})$ то положим:

$$H_k = -\frac{h_{k-1}}{\beta_{k-1}}(\xi_k, \xi_{k-1}) + \sqrt{r_k^2 - \left(\frac{h_{k-1}}{\beta_{k-1}}\right)^2} \sqrt{1 - (\xi_k, \xi_{k-1})^2}.$$

Иначе $H_k = r_k$.

Шаг к.4. Вычислим $h_k = h(r_k, H_k)$ по формуле (2.18) и $\beta_k = \beta(r_k, H_k)$ по формуле (2.19).

Шаг к.5. Вычислим очередную точку

$$x_{k+1} := x_k - h_k B_k \xi_k.$$

Шаг к.6. Вычислим

$$B_{k+1} := B_k R_{\beta_k}(\xi_k) \quad \text{и} \quad r_{k+1} = \sqrt{r_k^2 - \left(\frac{H_k}{2}\right)^2 \frac{(1 - \beta_k^2)^2}{\beta_k^2}}.$$

Шаг к.7. Переходим к $(k+1)$ -й итерации со значениями x_{k+1} , B_{k+1} , r_{k+1} , ξ_k , h_k и β_k .

Справедлива следующая теорема.

Теорема 2.4 Генерируемая УМЭ последовательность точек $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ удовлетворяет неравенству

$$\|A_k(x_k - x^*)\| \leq r_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.21)$$

где $A_k = B_k^{-1}$.

Множество точек x , удовлетворяющих неравенству $\|A_k(x_k - x)\| \leq r_k$, представляет собой локализуящую точку x^* эллипсоид \mathcal{E}_k , и вопрос о скорости сходимости УМЭ сводится к оценке скорости уменьшения объема эллипсоида \mathcal{E}_k . Ответ на этот вопрос дает следующая теорема.

Теорема 2.5 Коэффициент Q_k уменьшения объема на k -й итерации УМЭ не хуже, чем коэффициент q_n для МЭ, т.е.

$$Q_k \leq q_n = \sqrt{\frac{n-1}{n+1}} \left(\frac{n}{\sqrt{n^2-1}} \right)^n < \exp \left\{ -\frac{1}{2n} \right\} < 1.$$

В теореме 2.5 утверждается, что скорость сходимости УМЭ не хуже, чем скорость сходимости МЭ. Если на итерации $H_k \ll r_k$, то коэффициент Q_k будет значительно меньше, чем q_n . Естественно, что такие итерации способны значительно ускорить сходимость УМЭ по отношению к МЭ.

Таблица 2.2. Сравнение УМЭ и МЭ для функции $f_1(x_1, \dots, x_n)$

n	$r_0 = 5$		$r_0 = 10$		$r_0 = 100$		$r_0 = 1000$	
	K_1	K_2	K_1	K_2	K_1	K_2	K_1	K_2
2	108	82	118	76	136	105	145	113
3	254	151	255	162	297	181	326	208
4	429	217	456	247	565	241	614	306
5	694	299	718	328	850	364	911	373
10	2902	884	3081	823	3633	959	4011	1110
15	7625	1517	8195	1607	8825	1765	10094	1878
20	15646	2398	16066	2517	18145	2792	20009	3020
25	27375	3586	28619	3614	31325	4021	33469	4262
30	44495	4941	45431	5000	49391	5513	50000	5799

Это подтверждают вычислительные эксперименты для двух тестовых примеров, которые связаны с нахождением точки минимума выпуклой функции. В качестве тестовых рассматривались следующие функции:

$$f_1(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n 2^{i-1} x_i^2 \quad \text{и} \quad f_2(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n 2^{i-1} |x_i|.$$

Сравнительные результаты экспериментов для стартовой точки $x_0 = (1, \dots, 1)$ и четырех значений $r_0 = \{5, 10, 100, 1000\}$ приведены в таблице 2.2 для функции $f_1(x)$ и в таблице 2.3 для функции $f_2(x)$ при числе переменных от 2 до 30. Здесь K_1 – число итераций МЭ и K_2 – число итераций УМЭ, которые потребовались для нахождения точки минимума при одном и том же критерии останова. Для $f_1(x)$ использовался критерий останова $\|g(x_k)\| \leq 10^{-6}$, а для $f_2(x)$ критерий останова $f(x_k) - f^* \leq 10^{-6}$. Максимальное количество

Таблица 2.3. Сравнение УМЭ и МЭ для функции $f_2(x_1, \dots, x_n)$

n	$r_0 = 5$		$r_0 = 10$		$r_0 = 100$		$r_0 = 1000$	
	K_1	K_2	K_1	K_2	K_1	K_2	K_1	K_2
2	121	79	119	83	147	99	152	107
3	276	135	298	123	345	171	350	185
4	505	221	542	239	599	255	688	275
5	874	314	909	324	984	332	1109	404
10	3830	1061	4025	1002	4484	1167	4953	1254
15	9586	2169	9959	2134	10956	2376	11965	2680
20	18666	3786	19221	3924	20903	4283	22899	4483
25	31475	5758	32363	5846	35217	6595	38112	7187
30	48674	8246	49823	8297	50000	9036	50000	10158

итераций для МЭ было ограничено до 50000, что сработало для обеих функций при $n = 30$, $r_0 \geq 100$. Из таблиц видим, что по числу итераций УМЭ обгоняет МЭ, иногда и значительно (в 8 раз).

2.4 Методы простых эллипсоидов

Приведена геометрическая интерпретация итерационных процессов, которые используют описанные эллипсоиды, содержащие пересечение шара и гиперплоскости. Они позволяют реализовывать монотонные по объему методы для нахождения стационарных точек специальных задач на базе оператора растяжения пространства. Их „предельные“ варианты соответствуют бесконечному коэффициенту растяжения, они находят решение специальных задач не более чем за n итераций, где n – размерность пространства переменных.

Идея внешней аппроксимации некоторого стационарного множества монотонно уменьшающимися по объему эллипсоидами дает достаточно универсальный механизм для построения методов решения широкого класса задач. Среди них задача отыскания седловых точек выпукло-вогнутых функций,

частные случаи задач решения вариационных неравенств, специальные классы задач линейной дополнительнойности, общая задача выпуклого программирования а также задача безусловной минимизации выпуклой функции. Для двух последних задач в [61] обсуждались простые схемы построения методов эллипсоидов (МЭ), гарантирующие геометрическую скорость сходимости по последовательности рекордов минимизируемой функции $f(x)$, в предположении, что $f(x)$ – произвольная выпуклая функция.

Наряду с классом всех выпуклых функций часто приходится иметь дело с более узкими классами выпуклых функций. Так, например, класс выпуклых функций с ограниченной константой роста [130] содержит выпуклые функции $f(x)$, определенные в конечномерном евклидовом пространстве E^n , для которых найдутся точка $x^* \in X^*$ и константы $M \geq m \geq 1$, такие, что для всех $x \in E^n$ выполняется неравенство

$$m(f(x) - f^*) \leq (x - x^*, \partial f(x)) \leq M(f(x) - f^*), \quad (2.22)$$

где $\partial f(x)$ – субградиент $f(x)$ в точке x , $f^* = f(x^*)$ – значение минимума $f(x)$. Представляет интерес и частный случай этого класса ($m = M$), к которому относятся: дифференцируемые однородные (с показателем σ) выпуклые функции ($M = m = \sigma$), квадратичные выпуклые функции ($M = m = 2$), кусочно-линейные выпуклые функции с острым минимумом ($M = m = 1$).

Интересен следующий вопрос. Что может дать идея внешней аппроксимации некоторого стационарного множества монотонно уменьшающимися по объему эллипсоидами для специальных классов функций? Если на каждом шаге итерационного процесса придерживаться определенной схемы построения эллипсоида, содержащего пересечение шара и гиперплоскости, то ответ на этот вопрос можно дать как для задачи нахождения точки минимума x^* выпуклой функции, удовлетворяющей (2.22) при $m = M$ (при известном f^*), так и для задачи нахождения стационарной точки произвольной квадратичной функции. Ответ оказывается довольно интересен. Для обеих задач можно указать бесконечное число МЭ, которые на каждом шаге гарантируют уменьшение объема области локализации множества точек минимума

(стационарных точек) со сколь угодно большим коэффициентом. При этом „предельные“ варианты таких методов, т.е. которые используют бесконечный коэффициент, находят решение указанных задач не более, чем за n шагов, где n – размерность пространства переменных. Почему это так, что лежит в основе указанных процессов, какие схемы методов при этом получаются, и будет обсуждаться дальше.

Геометрическая интерпретация метода простых эллипсоидов.

Пусть заданы: шар $S_X(x_0, r_0) = \{x \in X = E^n : \|x - x_0\|^2 \leq r_0^2\}$ и гиперплоскость $P_X(p, t) = \{x \in X = E^n : (p, x) - t = 0\}$. Пространство X условимся называть исходным пространством аргументов или переменных. Шар $S_X(x_0, r_0)$ характеризуется параметрами: $x_0 \in E^n$ – центр шара и r_0 – радиус шара; гиперплоскость $P_X(p, t)$ характеризуется параметрами: $p \in E^n$ – ненулевой вектор (будем называть его вектором нормали к гиперплоскости $P_X(p, t)$), t – некоторый скаляр. Для удобства изложения нормированный вектор $\frac{p}{\|p\|}$ будем обозначать также через ξ .

Тело, полученное в результате пересечения шара $S_X(x_0, r_0)$ и гиперплоскости $P_X(p, t)$, обозначим $W_X(x_0, r_0, p, t)$, т.е.

$$W_X(x_0, r_0, p, t) = \{x \in E^n : x \in S_X(x_0, r_0) \cap P_X(p, t)\}.$$

Предположим, что оно непусто ($W_X(x_0, r_0, p, t) \neq \emptyset$). Это непринципиально, так как факт пересечения шара $S_X(x_0, r_0)$ и гиперплоскости $P_X(p, t)$ (увидим дальше) легко устанавливается путем анализа параметров x_0 , r_0 , p и t .

Что же такое тело $W_X(x_0, r_0, p, t)$? Пусть $S_X(x_1, r_1)$ – шар с центром в точке x_1 , которая есть проекцией точки x_0 на гиперплоскость $P_X(p, t)$, и радиусом $r_1 = \sqrt{r_0^2 - \rho_0^2}$, где ρ_0 – расстояние между точками x_0 и x_1 ($\rho_0 = \|x_0 - x_1\|$). $S_X(x_1, r_1) \equiv S_X(x_0, r_0)$, когда гиперплоскость $P_X(p, t)$ проходит через центр шара $S_X(x_0, r_0)$, т.е. $x_1 = x_0$ и $r_1 = r_0$. Когда $\rho_0^2 > r_0^2$ (что задает достаточное условие для останова алгоритмов), это означает, что $W_X(x_0, r_0, p, t) = \emptyset$, т.е. шар $S_X(x_0, r_0)$ и гиперплоскость $P_X(p, t)$ не пересекаются. В силу того, что точка x_1 является проекцией точки x_0 на гиперплоскость $P_X(p, t)$, данная

гиперплоскость проходит через центр шара $S_X(x_1, r_1)$. Тело $W_X(x_0, r_0, p, t)$ является пересечением шара $S_X(x_1, r_1)$ и гиперплоскости с нормалью ξ , проходящей через его центр, и будет представлять собой некоторый шар (с центром в x_1 и радиусом r_1) в подпространстве E^{n-1} пространства E^n , причем таком, что ортонормированный базис E^{n-1} лежит в ортогональном дополнении к вектору ξ . Точку x_1 условимся считать центром тела $W_X(x_0, r_0, p, t)$, r_1 – его радиусом, а описание тела $W_X(x_0, r_0, p, t)$ с их помощью обозначим $V_X(x_1, r_1, \xi)$. Тело $V_X(x_1, r_1, \xi) \equiv W_X(x_0, r_0, p, t)$ можно заключить в эллипсоид специального типа $ell(x_1, \xi, a, b)$ с центром в точке x_1 , для которого длина полуоси в направлении ξ равна a ($a > 0$ – произвольно), а длины полуосей в $(n - 1)$ – ортогональных к ξ и взаимно ортогональных направлениях одинаковы и равны b , где $b \geq r_1$.

Для преобразования эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ в шар нужно растянуть его в направлении ξ с таким коэффициентом, чтобы длины всех полуосей стали одинаковыми. Для этого достаточно использовать оператор растяжения пространства [130] в направлении ξ с коэффициентом, равным отношению длины полуоси b к длине полуоси a :

$$R_\alpha(\xi) = I + (\alpha - 1)\xi\xi^T, \quad \alpha = \frac{b}{a}, \quad (2.23)$$

где I – единичная матрица размера $n \times n$. В преобразованном оператором (2.23) пространстве аргументов $Y = R_\alpha(\xi)X$ получится некоторый новый шар $S_Y(y_1, b)$ радиуса b с центром в точке $y_1 = R_\alpha(\xi)x_1$, которая есть образом точки x_1 из X . Поскольку шар $S_Y(y_1, b)$ является образом в Y эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ из X , то он будет содержать образ тела $V_X(x_1, r_1, \xi)$ в пространстве Y , если длины полуосей $ell(x_1, \xi, a, b)$ выбирать как указано выше, т.е. $a > 0$, $b \geq r_1$.

Объем эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ будет равен v_0ab^{n-1} , где v_0 – объем единичного шара в E^n . Отношение объема эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ к объему исходного шара $S_X(x_0, r_0)$ равно

$$q = \frac{vol(ell(x_1, \xi, a, b))}{vol(S_X(x_0, r_0))} = \frac{v_0ab^{n-1}}{v_0r_0^n} = \left(\frac{a}{r_0}\right) \left(\frac{b}{r_0}\right)^{n-1}. \quad (2.24)$$

Второй сомножитель в правой части формулы (2.24) можно сделать меньшим или равным единице, выбирая для $ell(x_1, \xi, a, b)$ длину полуоси b из условия $r_1 \leq b \leq r_0$. Однако надеяться на существенное уменьшение q за счет сомножителя $\left(\frac{b}{r_0}\right)^{n-1}$ не имеет смысла, так как r_1 может быть очень близко к r_0 . В то же время первый сомножитель $\left(\frac{a}{r_0}\right)$ можно сделать сколь угодно малым в силу произвольного выбора для эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ длины полуоси a . Это позволяет сделать q сколь угодно малым и означает возможность гарантировать посредством выбора длины полуоси a сколь угодно большое уменьшение объема эллипсоида вида $ell(x_1, \xi, a, b)$, локализирующего тело $W_X(x_0, r_0, p, t)$.

При линейном невырожденном преобразовании пространства гиперплоскость переходит в гиперплоскость. Учитывая, что в преобразованном пространстве мы имеем шар некоторого заданного радиуса, то цикл таких построений можно замкнуть. Для нахождения точки из множества точек, принадлежащих пересечению некоторого набора гиперплоскостей, это дает возможность строить итерационные процессы описанных эллипсоидов и обосновывать их сходимость по такой характеристике, как монотонное уменьшение объема эллипсоидов, локализирующих это множество. Каждый шаг такого процесса интерпретируется как переход от эллипсоида вида $ell(y_1, \xi, a, b)$ в текущем преобразованном пространстве к шару в очередном преобразованном пространстве посредством применения оператора растяжения пространства. При этом очередная точка однозначно определяется центром тела $V_Y(y_1, r_1, \xi)$ в преобразованном пространстве переменных.

Следует отметить, что с позиций монотонного уменьшения объема длины полуосей эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$ не обязательно выбирать из вышеуказанных условий. Главное, чтобы выполнялось $a < r_0 \left(\frac{r_0}{b}\right)^{n-1} = b \left(\frac{r_0}{b}\right)^n$, что гарантирует $q < 1$ в формуле (2.24). Это значит, что не следует бояться увеличения радиуса шара в преобразованном пространстве переменных, если за счет этого можно добиться более сильного уменьшения объема. Однако такая ситуация более уместна при рассмотрении методов, основанных на оп-

тимальных эллипсоидах, содержащих такие выпуклые области как полушар (в классическом методе эллипсоидов) и „шаровой слой“ (в методах эллипсоидов с „глубокими отсечениями“) [34]. Вышерассматриваемый случай, хотя и близок к очень тонким шаровым слоям в E^n , все же отличается от последнего в том смысле, что „предельные“ формулы оптимального эллипсоида, содержащего такие слои, не дают гарантии неувеличения радиуса шара в преобразованном пространстве аргументов.

При выборе длин полуосей эллипсоида $ell(x_1, \xi, a, b)$, содержащего тело $V_X(x_1, r_1, \xi)$, естественно следовать такой стратегии. Для полуоси b выбираем ее оптимальное значение ($b = r_1$), т.е. равное минимальному радиусу шара, локализирующего тело $V_X(x_1, r_1, \xi)$. Выбор длины полуоси a осуществляется из условия $0 < a \ll r_1$. Особо следует выделить „предельный“ случай ($a = 0$), который допустим в силу произвольного выбора длины полуоси a . В данном случае оператор $R_\alpha(\xi)$ – „вырожден“, так как $\alpha = \infty$. Однако это не мешает реализации указанной схемы процессов описанных эллипсоидов, поскольку при реализации методов нужен не сам оператор $R_\alpha(\xi)$, а обратный к нему оператор $R_\beta(\xi)$, $\beta = \frac{1}{\alpha}$, который определен при $\alpha = \infty$. „Предельный“ случай фактически равносителен проектированию на гиперплоскость с нормалью ξ , и именно он гарантирует конечную сходимость методов описанных эллипсоидов, т.е. не более чем за n шагов, где n – размерность пространства переменных. Такие варианты методов удобнее рассматривать как „предельные“, им соответствует $\alpha = \infty$ и бесконечное уменьшение объема.

Три примера. Вышеизложенного достаточно, чтобы строить методы простых эллипсоидов для нахождения стационарных точек x^* некоторого множества X^* , если умеем строить гиперплоскости, проходящие через $x^* \in X^*$. В качестве примеров рассмотрим задачи, когда это просто сделать и когда „предельные“ варианты методов простых эллипсоидов сходятся за конечное число шагов.

Пример 1. Пусть требуется решить систему линейных уравнений $Ax = b$, где A – матрица размера $m \times n$, $x \in E^n$, $b \in E^m$. Тогда очевидно, что в

семейство X^* будут входить те точки, где $Ax^* = b$. Поэтому, задав некоторую стартовую точку x_0 и сделав предположение, что $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$, получаем все стартовые условия для реализации процесса описанных эллипсоидов для нахождения точки $x^* \in X^*$, удовлетворяющей следующим ограничениям:

$$(a_i, x^*) = b_i, i = 1, \dots, m, \quad (2.25)$$

$$\|x_0 - x^*\| \leq r_0, \quad (2.26)$$

где a_i – векторы строк матрицы A . Выбирая уравнения гиперплоскостей из (2.25), причем в произвольном порядке, в случае $\alpha = \infty$, не более чем за $\min(m, n)$ шагов, либо придем к точке $x^* \in X^*$, либо получим достаточное условие несовместности системы $Ax = b$ в шаре $S(x_0, r_0)$, задаваемым ограничением (2.26). Конкретный метод определяется последовательностью выбора гиперплоскостей из (2.25). Направления растяжения пространства будут совпадать с направлением нормалей гиперплоскостей в преобразованном пространстве аргументов.

Пример 2. Пусть x^* – точка, где достигается минимум выпуклой функции, удовлетворяющей (2.22) при $m = M$. Тогда равенство

$$m(f(x) - f^*) = (x - x^*, \partial f(x)),$$

которое справедливо для всех $x \in E^n$, дает возможность строить требуемые гиперплоскости, при условии знания f^* . Поэтому данная ситуация такая же, как и в примере 1, т.е. задав x_0 и $r_0 > \|x_0 - x^*\|$ можно строить семейство методов простых эллипсоидов, предельные варианты которых находят точку x^* не более чем за n шагов. Конкретный метод определяется тем набором точек, где будут вычисляться субградиенты, а растяжения пространства будут производиться в направлении вычисленных субградиентов. Метод, на каждом шаге которого субградиент вычисляется в центре шара текущего пространства переменных, будет соответствовать известному методу с классическим фейеровским шагом в направлении субградиента, который является предельным вариантом семейства методов эллипсоидов с растяжением пространства в направлении субградиента для класса выпуклых функций с ограниченной

константой роста [34].

Пример 3. Пусть X^* – множество стационарных точек квадратичной функции $f(x)$, $x \in E^n$. Тогда для всех $x^* \in X^*$ справедливо следующее равенство:

$$(x_h^* - x^*, \nabla f(x) - \nabla f(x(h))) = 0, \quad (2.27)$$

где $\nabla f(x)$ и $\nabla f(x(h))$ – градиенты $f(x)$ в точках x и $x(h) = x + hp$, а x_h^* – экстремальная точка, полученная из x в направлении p , т.е. точка экстремума функции $f(x)$ по направлению p (она вычисляется аналитически). Для квадратичных функций соотношение (2.27) дает возможность строить методы простых эллипсоидов для нахождения $x^* \in X^*$, предельные варианты которых находят x^* не более чем за n шагов. Структура таких методов будет определяться как набором точек, в которых будет вычисляться градиент, так и некоторым набором линейно независимых направлений. Операция растяжения пространства переменных будет реализовываться по разности двух последовательных градиентов, где первый вычисляется в выбранной для шага точке, а второй вычисляется в точке, где $f(x)$ достигает экстремума из данной точки по выбранному для шага направлению. Применительно к нахождению точек минимума неотрицательно определенных квадратичных функций такие методы не требуют априорного знания f^* . Для квадратичных функций r -алгоритм также оказывается методом простых эллипсоидов, только нужно учесть тот факт, что переход в экстремальную точку в направлении градиента дает возможность уменьшить радиус шара, локализирующего множество точек минимума.

Приведенные в примерах 2 и 3 свойства итерационных процессов простых эллипсоидов дают основания надеяться на создание эффективных методов минимизации некоторых классов выпуклых функций на базе оператора растяжения пространства. Так, например, если на первых шагах использовать сравнительно небольшие коэффициенты растяжения и увеличивать их по мере уточнения информации о свойствах функции, то для таких процессов, начиная с какого-то момента, можно обеспечить квадратичную скорость сходимости как для кусочно-линейных, так и для гладких выпуклых функций.

Для этого достаточно посредством использования небольших коэффициентов растяжения обеспечить такую окрестность точки x^* , в которой кусочно-линейная выпуклая функция удовлетворяет (2.22) при $M \simeq m = 1$, а гладкая выпуклая функция хорошо аппроксимируется квадратичной. В первом случае методы будут использовать операцию растяжения пространства в направлении субградиента, а во втором – операцию растяжения в направлении разности двух последовательных субградиентов, второй из которых получен согласно процедуре (точной или приближенной) спуска по направлению. Если при реализации таких методов использовать B -форму (т.е. корректируется матрица обратного преобразования), то они должны быть численно устойчивыми и при работе с существенно овражными функциями.

Следует отметить, что в рамках методов простых эллипсоидов можно найти простое объяснение ряду методов типа сопряженных направлений для квадратичных функций, при этом коэффициенты растяжения пространства будут ограничены как снизу, так и сверху. Кроме того, при создании методов можно использовать как априорную оценку расстояния до множества минимумов, так и выбор начальной стартовой точки.

2.5 Основные результаты раздела 2

В разделе описаны методы с однократным применением оператора растяжения пространства для внешней аппроксимации множества экстремумов эллипсоидами уменьшающегося объема. Кратко основные научные результаты раздела можно сформулировать следующим образом.

1. Разработаны две новые модификации метода эллипсоидов – приближенный метод эллипсоидов (ПМЭ) и ускоренный метод эллипсоидов (УМЭ). Показано, что ПМЭ имеет такую же асимптотическую скорость сходимости, как и классический метод эллипсоидов (МЭ) Юдина–Немировского–Шора. В отличие от последнего он применим для одномерного случая, где вырождается в метод близкий к методу дихотомии. Показано, что УМЭ имеет ускоренную скорость сходимости, в сравнении с МЭ, что дости-

гаются за счет использования информации об отсечении из предыдущей итерации. На примере минимизации овражных функций показано, что такое ускорение может быть в десятки раз. На основе ПМЭ разработан и обоснован алгоритм нахождения наилучшего по L_p -норме решения для несовместной системы линейных алгебраических уравнений с интервальными ограничениями на переменные.

2. Разработана общая схема проективных методов эллипсоидов, которая базируется на эллипсоиде, содержащем пересечение шара и гиперплоскости. Показано, что для решения специальных классов задач эти методы вырождаются в методы проектирования, которые заканчивают свою работу за k итераций, где k не более, чем n – размерность пространства переменных.

Результаты опубликованы в пяти¹ статьях в фаховых изданиях и докладывались на четырех² конференциях различного уровня.

¹[66] Стецюк П.И. К методам эллипсоидов // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1999. – С.27-33. [74] Стецюк П.И., Буханцов Д.М. К ускорению метода эллипсоидов с помощью использования шарового слоя // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2002. – С. 63-70. [76] Стецюк П.И. Приближенный метод эллипсоидов // Кибернетика и системный анализ. – 2003. – №3. – С. 141-146. [77] Стецюк П.И. Об одном эллипсоиде для внешней аппроксимации n -мерного полушара // Компьютерная математика. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. Выпуск 2. – С. 144-151. [78] Стецюк П.И., Колесник Ю.С., Березовский О.А. Об одном методе нахождения L_p -решения системы линейных уравнений // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. – С. 83-90.

²[73] Стецюк П.И., Буханцов Д.М. К ускорению метода эллипсоидов с помощью использования шарового слоя // Збірка тез міжнародної конференції "Обчислювальна та прикладна математика" присвяченої 80-річчю академіка І.І.Ляшка (9.09.–10.09.2002) – Київ, 2002 – С. 94. [72] Стецюк П.І. Про одну модифікацію методу еліпсоїдів // Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень", Ужгород, 7-12 жовтня 2002. Праці школи семінару. – С. 64. [75] Стецюк П.И. Модификация метода эллипсоидов // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. №10. Научное издание. Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – С. 216-217. *Бюллетень содержит тезисы докладов 12-й Всероссийской конференции "Математическое программирование и приложения" (Екатеринбург, 24-28 февраля 2003 г.)*. [206] Stetsyuk P., Nurminski E. On a modification of ellipsoid method // Материалы международной научной конференции "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии", 24–26 марта 2010, Кишинэу, Академия транспорта, информатики и коммуникаций. – С. 37-42.

Раздел 3

Субградиентные методы минимизации овражных функций

В разделе приведены исследования по субградиентным методам минимизации негладких овражных выпуклых функций и их применениям.

В подразделе 3.1 приводится описание субградиентного метода Поляка для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. Анализируются способы его ускорения для овражных функций. В подразделе 3.2 приведены два субградиентных метода с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном ее оптимальном значении [94, 33, 114, 115]. Оба метода используют шаг Поляка и преобразуют пространство переменных с помощью однорангового линейного оператора. Первый метод преобразует пространство по двум последовательным субградиентам, если угол между ними тупой. Второй метод использует еще и агрегатный вектор, который является выпуклой комбинацией вычисленных ранее субградиентов. Приведены результаты вычислительных экспериментов и проведено их сравнение с r -алгоритмом Шора-Журбенко.

В подразделе 3.3 рассматривается метод фейеровского типа с преобразованием пространства для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства [67]. Здесь приведены вычислительная схема метода и теоремы о его сходимости. В подразделе 3.4 описаны три итерационных метода для решения системы линейных алгебраических уравнений [69]. Эффективность методов подтверждена численными экспериментами при решении плохообусловленных систем линейных уравнений с матрицей Гильберта. В подразделе 3.5 приведены линейные операторы преобразования пространства для двух квази-ньютоновских методов: Давидона-Флетчера-Пауэлла и Бройдена-Флетчера-Шенно и анализируется их связь с r -алгоритмами [65].

3.1 Субградиентный метод Поляка и проблема овражности

Обсуждается субградиентный метод Поляка для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. Приведены результаты его работы для овражных функций двух переменных. Обсуждаются два способа ускорения сходимости метода Поляка для овражных функций.

Субградиентный метод Поляка. Пусть $f(x)$ – выпуклая функция векторного аргумента $x \in E^n$ и ее субградиент $\partial f(x)$ удовлетворяет условию:

$$(x - x^*, \partial f(x)) \geq m(f(x) - f^*), \quad \forall x \in E^n, \quad m \geq 1. \quad (3.1)$$

Здесь E^n – евклидово пространство размерности n со скалярным произведением (x, y) ; x^* – единственная точка минимума функции $f(x)$; f^* – минимальное значение функции $f(x)$: $f^* = f(x^*)$. Параметр m считается известным, он введен для учета специальных классов выпуклых функций, например, для квадратичной гладкой функции $m = 2$. Значение $m = 1$ обеспечивает выполнение условия (3.1) для произвольной выпуклой функции.

Пусть известно значение f^* . Для нахождения точки x^* применяется субградиентный метод Поляка [47, 46]:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{\partial f(x_k)}{\|\partial f(x_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

При $m = 1$ метод (3.2) имеет простой геометрический смысл. Функция $f(x)$ аппроксимируется линейной $\tilde{f}(x) = f(x_k) + (f'(x_k), x - x_k)$ и шаг выбирается так, чтобы эта аппроксимирующая функция стала равной f^* (т. е. $\tilde{f}(x_{k+1}) = f^*$). Для одномерного случая метод Поляка совпадает с методом Ньютона для решения уравнения $f(x) = f^*$.

Величину h_k называют шагом Поляка или шагом Агмона-Моцкина-Шенберга. Впервые такой шаг был использован в [151, 188] в релаксационном (субградиентном) методе для нахождения хотя бы одного решения совместной системы линейных неравенств. Шаг h_k задает величину максимального сдвига в направлении нормированного антисубградиента, при котором угол между антисубградиентом и направлением из точки x_{k+1} в точку минимума будет нетупым. Это гарантирует уменьшение расстояния до множества X^* на каждой итерации метода (3.2).

Теорема 3.1 Для всех точек, генерируемых методом (3.2), справедливы неравенства

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.3)$$

Доказательство. Для произвольного k ($k \geq 0$) имеем

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \left\| x_k - x^* - h_k \frac{\partial f(x_k)}{\|\partial f(x_k)\|} \right\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2h_k \frac{(x_k - x^*, \partial f(x_k))}{\|\partial f(x_k)\|} + h_k^2.$$

Учитывая, что из (3.1) следует неравенство

$$\frac{(x_k - x^*, \partial f(x_k))}{\|\partial f(x_k)\|} \geq \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} = h_k,$$

имеем

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - h_k^2 = \|x_k - x^*\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} \right)^2,$$

что дает неравенства (3.3). Теорема 3.1 доказана.

Проблема овражности. В [46, 47] показано, что метод (3.2) сходится со скоростью геометрической прогрессии, и отмечается, что во многих практических задачах знаменатель прогрессии может оказаться близким к единице. Для гладкого случая этот факт также хорошо известен (градиентные методы медленно сходятся для функций овражного типа). Тот же эффект имеет место и в негладком случае, например, для функции двух переменных $f(x) = |x_1| + t|x_2|$ метод (3.2) сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\sqrt{1 - \frac{1}{t^2}}$, т.е. очень медленно для больших t .

Медленную скорость сходимости метода Поляка проиллюстрируем на примере трех выпуклых функций от двух переменных, первые две функции – негладкие (овражная и существенно овражная), а третья – квадратичная овражная функция. В табл. 3.1 приведено количество итераций метода (3.2) для нахождения последовательно уточняемых приближений к единственной точке минимума $x^* = (0, 0)$. Эти приближения заданы десятью последовательно уменьшающимися (на порядок) значениями $\text{epsf} = \varepsilon_f$ (первая колонка в табл. 3.1). Метод Поляка прекращал работу или на итерации $k = itn$, для

Таблица 3.1. Сходимость метода Поляка для двумерных овражных функций

epsf	itn1	itn2	itn3	itn4	itn5	itn6	itn7
1.0e-01	14	119	1080	16	6	6	6
1.0e-02	24	212	1919	162	10	10	10
1.0e-03	34	305	2759	1604	12	12	12
1.0e-04	45	398	3598	16004	16	16	16
1.0e-05	55	492	4437	20000	20	20	20
1.0e-06	65	585	5277	20000	22)	22	22
1.0e-07	76	678	6116	20000	26)	26	26
1.0e-08	86	771	6955	20000	28	30	30
1.0e-09	96	865	7795	20000	32	32	32
1.0e-10	107	958	8634	20000	36	36	36

которой $f(x_{itn}) - f^* \leq \varepsilon_f$, или если превышено максимальное количество итераций, равное 20000.

Колонки itn1, itn2 и itn3 отвечают овражной кусочно-линейной функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ для значений t равных 3, 9 и 27 соответственно. При расчетах использовалась стартовая точка $x_0 = (1, 1)$ и параметр $m = 1$. Из табл. 3.1 видим, что количество итераций существенно увеличивается с ростом t . Для того чтобы найти точку, где значение функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + 27|x_2|$ отличается от минимального $f_1^* = 0$ не более, чем на $\varepsilon_f = 10^{-10}$, методу Поляка потребовалось 8634 итерации. Такая же точность для функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ при $t = 100$ не обеспечивается даже при ста тысячах итераций метода Поляка.

Для существенно овражной кусочно-квадратичной функции $f_2(x_1, x_2) = \max \{x_1^2 + (2x_2 - 2)^2 - 3, x_1^2 + (x_2 + 1)^2\}$ зигзагообразная траектория последовательных приближений метода Поляка приведена на рис. 3.1. Здесь метод Поляка находит приближение, где значение функции $f_2(x_1, x_2)$ отличается от минимального $f_2^* = 1$ не более, чем на 0.0001, только за 16004 итераций (см. колонку itn4 в табл. 3.1).

Для функций $f_1(x_1, x_2)$ и $f_2(x_1, x_2)$ использовался параметр $m = 1$, который можно применять для произвольной выпуклой функции. Для квадра-

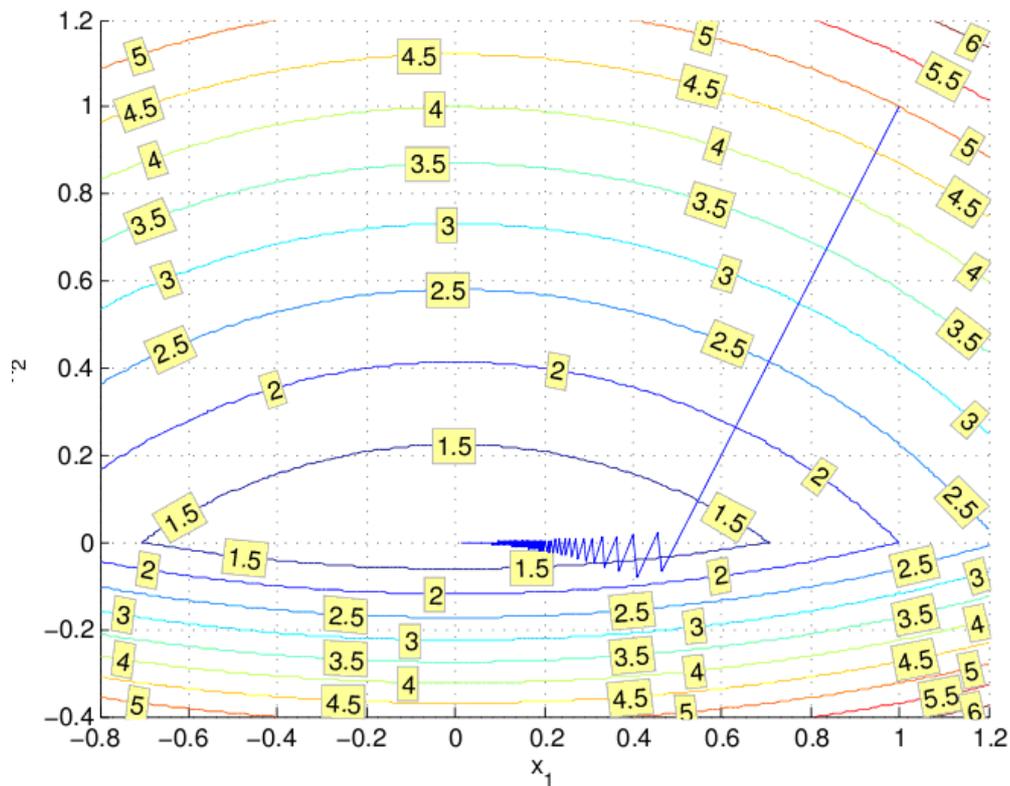


Рис. 3.1. Траектория метода Поляка для $f_2(x_1, x_2)$ ($x_0 = (1, 1)$)

точной функции $f_3(x_1, x_2) = x_1^2 + tx_2^2$, $t > 0$ использовался параметр $m = 2$. Он в два раза увеличивает длину шага Поляка, соответствующего параметру $m = 1$, и обеспечивает более быструю скорость сходимости с различных начальных приближений. Количество итераций метода Поляка со стартовой точки $x_0 = (0, 0)$ приведено в колонках itn5, itn6 и itn7 и соответствует значениям t равным 100, 10000 и 1000000.

Из таблицы 3.1 видим, что вопрос об ускорении сходимости метода (3.2) является актуальным. Ниже будут рассмотрены два способа его ускорения.

Способы ускорения Поляка и Шора. Первый способ в 1969 году предложил Б.Т. Поляк в статье [46]. Он состоит в том, чтобы вблизи минимума функцию $f(x)$ аппроксимировать кусочно-линейной функцией, используя информацию из предыдущих итераций. Самый общий метод, реализующий способ Поляка, имеет следующий вид:

$$x_{k+1} = P_{Q_k}(x_k), \quad Q_k = \{x : f(x_i) + (\partial f(x_i), x - x_i) \leq f^*, \quad i \in I_k\}, \quad (3.2a)$$

где I_k – любое подмножество индексов из $0, 1, \dots, k$, которое обязательно содержит индекс k , P_{Q_k} – оператор проектирования на множество Q_k .

Метод (3.2а) также сходится со скоростью геометрической прогрессии и не медленнее, чем метод (3.2), а его частные случаи очень тесно связаны с другими известными методами. Так, если $I_k = \{0, 1, \dots, k\}$, то метод (3.2а) дает точный минимум для кусочно-линейной функции, причем он идейно близок к методу Келли [180]. Если множество $I_k = \{k - 1, k\}$, то проекцию на множество Q_k можно выписать явно. В этом случае метод (3.2а) близок к методу из [163], который использует всего два вектора и для построения очередного направления спуска использует линейную комбинацию направления субградиента и направления движения на предыдущем шаге (по типу сопряженных градиентов) с тем, чтобы оно составляло более острый угол с направлением на минимум.

Второй способ ускорения метода (3.2) базируется на идее Н.З. Шора (1969) и связан с использованием линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций. Ниже в подразделе 3.2 будут рассмотрены субградиентные методы с шагом Поляка и преобразованием пространства переменных, которое обеспечивает монотонное уменьшение расстояния до точки минимума и направлено на уменьшение степени овражности поверхностей уровня выпуклых функций подобно тому, как это сделано в r -алгоритмах Шора. Преобразование пространства осуществляется только тогда, когда обнаружено зигзагообразное движение вдоль русла оврага. Например, когда угол между двумя последовательными субградиентами тупой.

Тупой угол между двумя нормированными векторами ξ и η из E^n можно преобразовать в прямой с помощью линейного оператора из E^n в E^n , который в матричной форме представим

$$T_1(\xi, \eta) = I - \frac{1}{1 - (\xi, \eta)^2} \left(\left(1 - \sqrt{1 - (\xi, \eta)^2} \right) \eta - (\xi, \eta) \xi \right) \eta^T. \quad (3.4)$$

Здесь $\xi, \eta \in E^n$ – векторы, такие что $\|\xi\| = 1$, $\|\eta\| = 1$ и их скалярное произ-

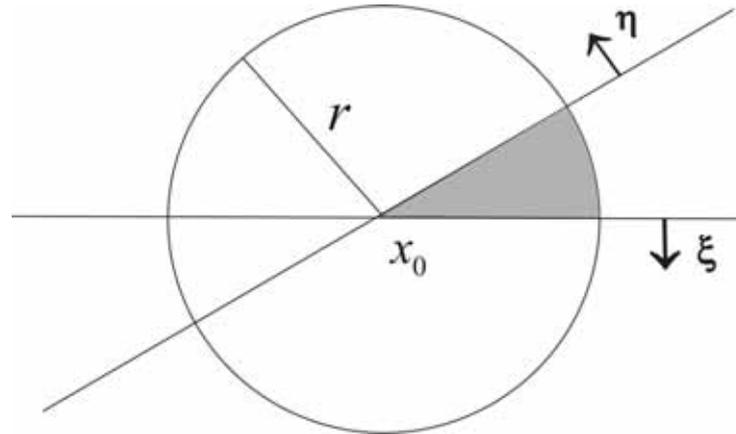


Рис. 3.2. Тело W (проекция на плоскость)

ведение удовлетворяет условию $(\xi, \eta)^2 \neq 1$, I – единичная матрица размера $n \times n$. Для оператора $T_1(\xi, \eta)$ существует обратный $T_1^{-1}(\xi, \eta)$

$$T_1^{-1}(\xi, \eta) = I + \frac{1}{\sqrt{1 - (\xi, \eta)^2}} \left(\left(1 - \sqrt{1 - (\xi, \eta)^2}\right) \eta - (\xi, \eta)\xi \right) \eta^T \quad (3.5)$$

Оператор $T_1(\xi, \eta)$ введен в [64] под названием "одноранговый эллипсоидальный оператор". Он связан с преобразованием в шар специального эллипсоида, описанного вокруг тела W (см. рис. 3.2), которое получено в результате пересечения шара и двух полупространств, проходящих через центр шара. В случае тупого угла между нормальными полупространств этот эллипсоид содержит тело W и является минимальным по объему в рамках семейства эллипсоидов, центр которых совпадает с центром шара (см. рис. 3.3).

Если угол φ между векторами ξ и η тупой, то специальный эллипсоид содержит тело W . Его объем меньше, чем объем шара, и это уменьшение равно $\sqrt{1 - (\xi, \eta)^2} = \sqrt{1 - (\cos \varphi)^2}$. Преобразовать специальный эллипсоид в шар можно либо растяжением пространства в направлении $\frac{\xi - \eta}{\|\xi - \eta\|}$ с коэффициентом $\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + (\xi, \eta)}}$ и сжатием пространства в ортогональном направлении $\frac{\xi + \eta}{\|\xi + \eta\|}$ с коэффициентом $\alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{1 - (\xi, \eta)}}$, либо с помощью однорангового эллипсоидального оператора $T_1(\xi, \eta)$.

В преобразованном пространстве эллипсоид станет шаром, а образы векторов ξ и η будут ортогональными (см. рис. 3.4). Это позволяет „расширить“

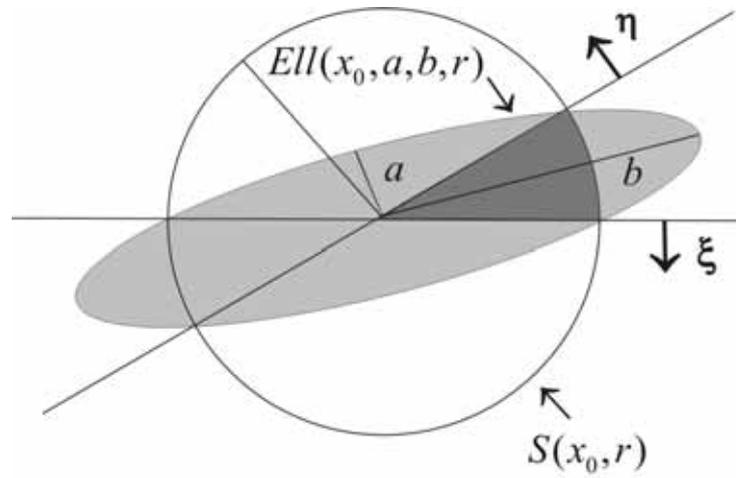


Рис. 3.3. Специальный эллипсоид, содержащий тело W

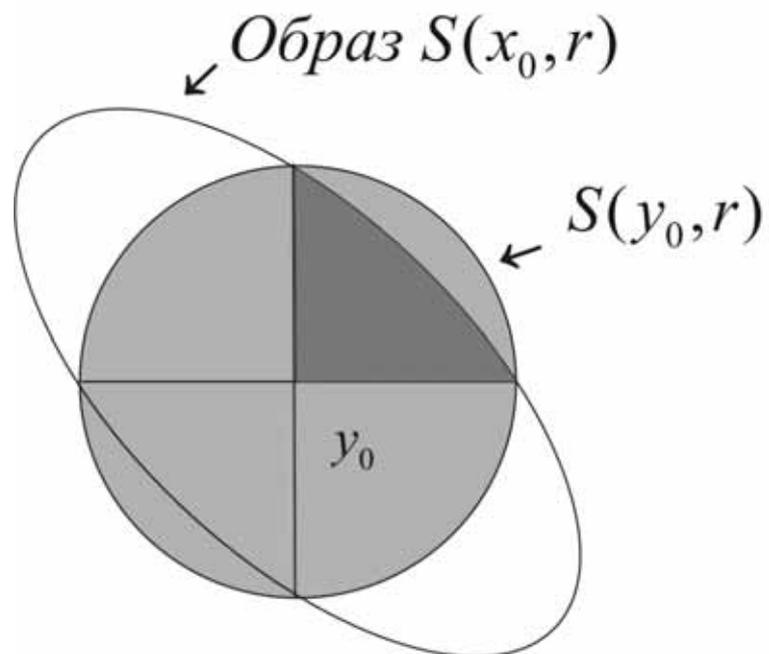


Рис. 3.4. Оптимальный эллипсоид после преобразования

конус подходящих направлений убывания функции для субградиентного процесса в преобразованном пространстве переменных, подобно тому как это делается в r -алгоритмах. Однако, здесь растяжение пространства реализуется в направлении разности двух нормированных субградиентов и близким к направлению разности двух субградиентов оно будет только тогда, когда нормы субградиентов близки.

3.2 Ускоренные модификации субградиентного метода Поляка

Обсуждаются два субградиентных метода с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. В методах используется шаг Поляка в направлении нормированного антисубградиента и гарантируется монотонное уменьшение расстояния до точки минимума в последовательно преобразованных пространствах переменных. Преобразование пространства производится с помощью однорангового эллипсоидального оператора и направлено на уменьшение степени овражности поверхностей уровня выпуклых функций.

Сходимость метода Поляка для овражных функций определяет угол между двумя последовательными субградиентами: $\partial f(x_k)$ и $\partial f(x_{k+1})$. Чем ближе этот угол к 180 градусам, тем более медленной будет скорость сходимости. Если на каждой итерации избавляться от тупого угла между последовательными субградиентами в преобразованном пространстве переменных, то для овражных функций следует ожидать повышения скорости сходимости такого метода. Этот принцип реализован в изложенной ниже модификации метода Поляка и сделано это с помощью однорангового эллипсоидального оператора.

Метод `amsg2`. Модификация субградиентного метода Поляка имеет вид:

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \frac{B_k^T \partial f(x_k)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(f(x_k) - *)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.6)$$

где матрица $B_0 = I$, а матрица B_{k+1} размера $n \times n$ вычисляется по правилу:

$$B_{k+1} = \begin{cases} B_k, & \text{если } \mu_k \geq 0, \\ B_k + (B_k \eta) \xi_{k+1}^T, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (3.7)$$

где

$$\mu_k = (\xi_k, \xi_{k+1}), \quad \xi_k = \frac{B_k^T \partial f(x_k)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad \xi_{k+1} = \frac{B_k^T \partial f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|},$$

$$\eta = \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{\mu_k}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} \xi_k.$$

Метод (3.6), (3.7) условимся называть методом `amsg2`. Здесь „ams“ указывает на способ регулировки шага в направлении нормированного антисубградиента, а „g2“ указывает, что `ams`-шаг (Agmon-Motzkin-Schoenberg step, шаг Поляка) используется в пространстве переменных, преобразованном с помощью двух последовательных субградиентов (`g2`).

Метод `amsg2` является ускоренным методом Поляка за счет антио вражного приема, подобного тому, который использован в r -алгоритмах Шора. Действительно, на k -й итерации растяжение пространства производится в направлении разности нормированных последовательных субградиентов в преобразованном пространстве переменных: $y = A_k x = B_k^{-1} x$, где B_k – невырожденная матрица размерности $n \times n$. Если нормы субградиентов одинаковы, то это направление совпадает с разностью двух последовательных субградиентов, по которой осуществляется растяжение пространства в r -алгоритмах. Отличие состоит в том, что в преобразованном пространстве переменных для r -алгоритмов второй субградиент определяется согласно шагу наискорейшего спуска в направлении антисубградиента, а для метода `amsg2` – согласно шагу Поляка (шагу Агмона-Моцкина-Шенберга).

Теорема 3.2 [94]. Пусть $A_k = B_k^{-1}$, $A_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$. Для всех точек, генерируемых методом (3.6), (3.7), справедливы неравенства

$$\|A_{k+1}(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|A_k(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3.8)$$

Неравенства (3.8) означают, что в каждом очередном преобразованном пространстве переменных гарантируется уменьшение расстояния до множества точек минимума. Поэтому для каждой итерации $k > 1$ имеет место неравенство

$$\|A_k(x_k - x^*)\|^2 \leq \|x_0 - x^*\|^2 - \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{m(f(x_i) - f^*)}{\|B_i^T \partial f(x_i)\|} \right)^2.$$

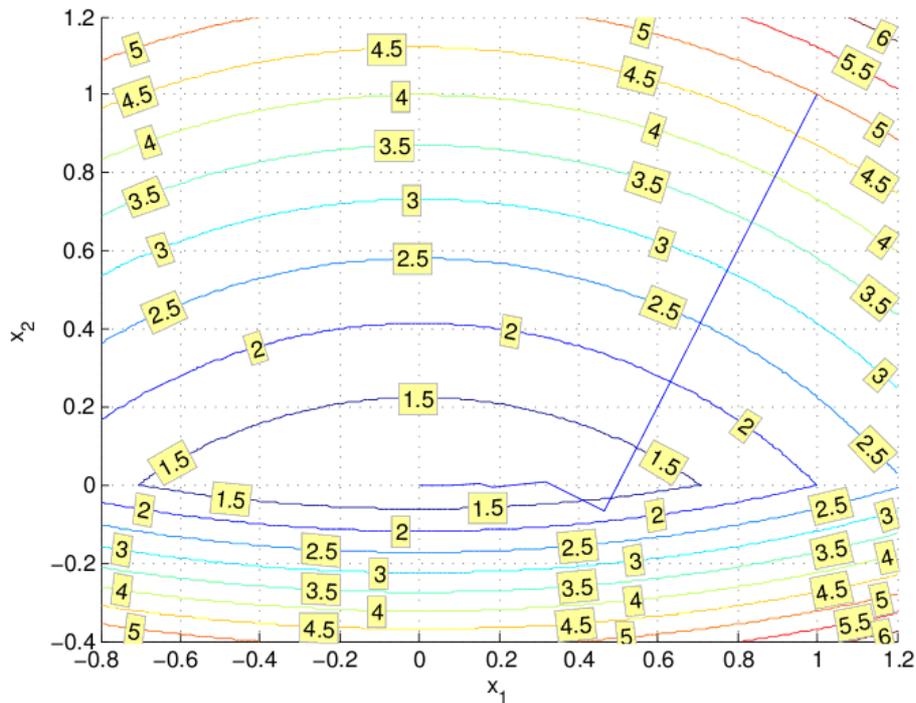


Рис. 3.5. Траектория метода `amsg2` для $f_2(x_1, x_2)$ ($x_0 = (1, 1)$)

Для овражных функций детерминант матрицы B_k уменьшается, а следовательно уменьшается объем эллипсоида, локализирующего точку x^* . Действительно, если на k -м шаге выполняется преобразование пространства, то

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \det(I + \eta \xi_{k+1}^T) = \det(B_k) \sqrt{1 - \mu_k^2} = \det(B_k) \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k},$$

где φ_k – тупой угол между двумя последовательными субградиентами.

Для овражных негладких функций метод `amsg2` имеет ускоренную сходимость по сравнению с методом Поляка (3.2). Так, например, для кусочно-линейной функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ при любом значении параметра $t > 1$ и произвольной стартовой точке x_0 метод `amsg2` находит точку минимума $x^* = (0, 0)$ не более, чем за три итерации. Заметим, что метод Поляка сходится к x^* со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\sqrt{1 - 1/t^2}$ и требует существенного количества итераций даже при сравнительно небольших значениях t .

Траектория метода `amsg2` для кусочно-квадратичной функции $f_2(x_1, x_2)$ приведена на рис. 3.5, здесь метод находит точку, где $f_2(x) < 1 + 10^{-5}$ всего за 16 итераций, а где $f_2(x) < 1 + 10^{-10}$ – за 31 итерацию. В таблице 3.2 дано

Таблица 3.2. Итерации метода Поляка (itn1) и метода `amsq2` (itn2) по нахождению с точностью `epsf` минимума кусочно-линейной функции $f(x) = \sum_{i=1}^{10} q^{(i-1)/9} |x_i - 1|$ при трех степенях вытянутости: $q = 3$, $q = 9$ и $q = 27$.

eps	itn1	itn2	itn1	itn2	itn1	itn2
1.e-01	31	15	220	37	1645	64
1.e-02	72	24	458	44	3257	73
1.e-03	113	29	695	49	4871	78
1.e-04	155	38	933	54	6481	80
1.e-05	196	43	1170	59	8083	84
1.e-06	237	50	1407	62	9633	91
1.e-07	279	54	1642	66	10000	93
1.e-08	320	59	1874	74	10000	100
1.e-09	362	62	2101	78	10000	108
1.e-10	403	65	2322	85	10000	113

сравнение обоих методов для кусочно-линейной функции от 10 переменных при трех различных степенях вытянутости. Расчеты выполнены при $m = 1$ и $x_0 = (0, \dots, 0)^T$. Из таблицы легко видеть, что по мере увеличения степени вытянутости разрыв между методом Поляка и методом `amsq2` по количеству итераций увеличивается.

Метод `amsq2p` [94, 113]. Метод (3.6), (3.7) можно усилить более радикальным уменьшением объема эллипсоида, локализирующего точку x^* . Если на k -й итерации была реализована операция преобразования пространства, то в преобразованном пространстве $Y = A_{k+1}X = B_{k+1}^{-1}X$ для функции $\phi_{k+1}(y) = f(B_{k+1}y)$ субградиенты будут ортогональны и в силу шага Поляка полупространства, определяемые ими в точке $y_{k+2} = A_{k+1}x_{k+2}$, не отсекают точку $y^* = A_{k+1}x^*$. Очевидно, что если вычисленный в точке y_{k+2} субградиент образует тупой угол с двумя предыдущими, то можно уменьшить объем области локализации x^* . Для этого достаточно выбрать в качестве векторов, определяющих оператор $T_1(\xi, \eta)$, субградиент в точке y_{k+2} и вектор, являющийся выпуклой комбинацией первых двух, так, чтобы угол между ними был максимально тупым. Для очередной итерации (если выполняется преобразование пространства) эта ситуация повторяется, только в качестве перво-

го вектора уже будет использоваться не субградиент, а вектор, являющийся выпуклой комбинацией двух предыдущих субградиентов в очередном преобразованном пространстве. Это позволяет построить конструктивное правило использования агрегированного вектора в качестве одного из векторов, определяющих оператор $T_1(\xi, \eta)$.

Метод, построенный на этом принципе, условимся называть `amsg2p`. В его названии "ams" указывает на способ регулировки шага в направлении нормированного антисубградиента, а "g2p" указывает, что `ams`-шаг используется в пространстве переменных, преобразованном с помощью двух последних субградиентов (`g2`) и агрегатного вектора (`p`). Преобразование пространства реализуется с помощью однорангового эллипсоидального оператора и только на тех итерациях метода, когда тупым является хотя бы один из углов – угол между двумя последовательными субградиентами, либо угол между последним субградиентом и агрегатным вектором, который является выпуклой комбинацией вычисленных на предыдущих итерациях субградиентов.

Метод `amsg2p` расширен на случай произвольного значения $f_{min} \geq f^*$ [107]. Он позволяет либо найти такую точку, где значение выпуклой функции $f(x)$ меньше или равно $f_{min} + \varepsilon$, либо гарантирует достаточное условие того, что точки, где значение $f(x)$ равно f_{min} , в шаре заданного радиуса не существует. В первом случае метод `amsg2p` находит точку $x_\varepsilon^* \in \{x : f(x) - f_{min} \leq \varepsilon\}$ и соответствующий ей номер итерации k_ε^* , а во втором – останавливается с сообщением "точки не существует". Метод `amsg2p` состоит в следующем.

На итерации $k = 0$ заданы: начальное приближение $x_0 \in E^n$; начальный радиус r_0 такой, что $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$; достаточно малое $\varepsilon > 0$. Вычислим $f(x_0)$ и $\partial f(x_0)$. Если $f(x_0) - f_{min} \leq \varepsilon$, то $x_\varepsilon^* = x_0$, $k_\varepsilon^* = 0$ и окончание работы алгоритма. Иначе положим $h_0 = \frac{m(f(x_0) - f_{min})}{\|\partial f(x_0)\|}$, $\xi_0 = \frac{\partial f(x_0)}{\|\partial f(x_0)\|} \in E^n$, $p_0 = 0 \in E^n$, $B_0 = I$ – единичная $n \times n$ -матрица. Перейдем к следующей итерации.

Пусть на k -й итерации получены $x_k \in E^n$, $h_k, r_k, \xi_k \in E^n$, $p_k \in E^n$, B_k – матрица $n \times n$. Для $(k + 1)$ -й итерации выполним пп. 1-5.

1. Вычислим $t_k = h_k / r_k$. Если $t_k > 1$, то "точки не существует" и оконча-

ние алгоритма. Иначе положим $r_{k+1} = r_k \sqrt{1 - t_k^2}$ и вычислим очередное приближение

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k.$$

2. Вычислим $f(x_{k+1})$ и $\partial f(x_{k+1})$. Если $f(x_{k+1}) - f_{min} \leq \varepsilon$, то $x_\varepsilon^* = x_{k+1}$, $k_\varepsilon^* = k + 1$ и окончание работы алгоритма. Иначе положим

$$\xi_{k+1} = \frac{B_k^T \partial f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}, \quad h_{k+1} = \frac{m(f(x_{k+1}) - f_{min})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}.$$

3. Вычислим $\lambda_1 = -p_k^T \xi_{k+1}$ и $\lambda_2 = -\xi_k^T \xi_{k+1}$. Положим

$$p_{k+1} = \begin{cases} \frac{\lambda_1}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}} p_k + \frac{\lambda_2}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}} \xi_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 > 0, \\ p_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0, \\ \xi_k, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 > 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0. \end{cases}$$

4. Вычислим $\mu_k = p_{k+1}^T \xi_{k+1}$. Если $-1 < \mu_k < 0$, то вычислим

$$B_{k+1} = B_k + (B_k \eta) \xi_{k+1}^T, \quad \text{где } \eta = \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{\mu_k}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} p_{k+1},$$

и пересчитаем

$$h_{k+1} = \frac{h_{k+1}}{\sqrt{1 - \mu_k^2}}, \quad p_{k+1} = \frac{1}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} (p_{k+1} - \mu_k \xi_{k+1}).$$

Иначе положим $B_{k+1} = B_k$ и $p_{k+1} = 0$.

5. Перейдем к следующей итерации с x_{k+1} , h_{k+1} , r_{k+1} , ξ_{k+1} , p_{k+1} , B_{k+1} .

Теорема 3.3 [115]. Пусть $A_k = B_k^{-1}$, $A_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$. Если $f_{min} \geq f^*$, то для генерируемых методом *atmsg2p* точек x_k , $k = 0, 1, \dots$ справедливы неравенства

$$\|A_{k+1}(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|A_k(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f_{min})}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|} \right)^2. \quad (3.9)$$

Теорема 3.3 означает, что в каждом очередном преобразованном пространстве переменных расстояние до точки минимума уменьшается. Благодаря этому для каждой итерации $k > 1$ имеем неравенство

$$\|A_k(x_k - x^*)\|^2 \leq \|x_0 - x^*\|^2 - \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{m(f(x_i) - f_{min})}{\|B_i^T \partial f(x_i)\|} \right)^2 = r_0^2 - \sum_{i=0}^{k-1} h_i^2 = r_k^2,$$

Таблица 3.3. Сходимость `amsg2p` для квадратичных функций, $n = 200$

eps	itn(Q_1)	itn(Q_2)	itn(Q_3)	itn(Q_4)	itn(Q_5)
1.00E-003	11	36	84	361	773
1.00E-005	15	46	99	405	826
1.00E-007	18	56	113	430	868
1.00E-009	22	65	128	461	916
1.00E-011	25	73	142	493	947
1.00E-013	29	81	154	517	979
1.00E-015	32	89	167	541	1006
1.00E-017	35	96	180	560	1027
1.00E-019	39	102	189	574	1042
1.00E-020	41	105	196	585	1048

с помощью которого обеспечивается достаточное условие отсутствия точки x_ε^* при $f_{min} < f^* - \varepsilon$ (реализовано в п. 1 метода `amsg2p`).

Для овражных функций метод `amsg2p` обладает ускоренной сходимостью при произвольной начальной стартовой точке x_0 и достаточно малых значениях параметра ε ($\varepsilon \sim 10^{-10} - 10^{-14}$). Это подтверждают приведенные в табл. 3.3 результаты вычислительных экспериментов для квадратичных функций от $n = 200$ переменных с различной степенью овражности (рассматривалась функция $f(x) = \sum_{i=1}^n q^{i-1} x_i^2$, а степень овражности считалась величина $Q = q^{n-1}$). При расчетах использовался параметр $m = 2$, $f_{min} = f^* = 0$, $x_0 = (1, \dots, 1)^T$. Для ряда стремящихся к нулю $\varepsilon = epsf$ в таблице приведены количества итераций, которые требуются при степенях овражности $Q_1 = 10$, $Q_2 = 100$, $Q_3 = 1000$, $Q_4 = 10^6$, $Q_5 = 10^9$.

Метод `amsg2p` можно использовать для нахождения достаточно точного приближение к единственной точке минимума существенно овражных функций. Проиллюстрируем это на известной тестовой задаче `maxquad` [185], которая связана с минимизацией существенно овражной выпуклой кусочно-квадратичной функции $f(x) = \max_{1 \leq k \leq 5} \varphi_k(x)$, $x \in R^{10}$. Здесь $\varphi_k(x) = x^T H_k x - b_k^T x$, H_k – симметричные 10×10 -матрицы, такие что $H_{kij} = e^{i/j} \cos(ij) \sin k$, если $i < j$, и $H_{kii} = i |\sin k| / 10 + \sum_{j \neq i} |H_{kij}|$, а компоненты векторов b_k опре-

деляются $b_{ki} = e^{i/k} \sin(ik)$.

Трудоёмкость метода `amsg2p` для нахождения решения с достаточно высокой точностью (до 14-ти значащих цифр) позволяет оценить приведенный ниже фрагмент численных расчетов с одноименной программой `amsg2p` на языке `octave` [42].

```

Maxquad: f(x0)    5.3370664293114e+003
           fmin = -8.4140833459641e-001
..epsf..  .....f(itn).....  .itn.
1.0e-001  -7.7355266120112e-001    17
1.0e-003  -8.4084776169123e-001    29
1.0e-004  -8.4132394277880e-001    35
1.0e-005  -8.4140078034524e-001    41
1.0e-006  -8.4140807664455e-001    49
1.0e-011  -8.4140833458913e-001    94
1.0e-012  -8.4140833459555e-001   101
1.0e-013  -8.4140833459633e-001   110
1.0e-014  -8.4140833459640e-001   116
1.0e-015  -8.4140833459641e-001   122

```

В программе использовались $m = 1$, $x_0 = (1, \dots, 1)^T$ и $\varepsilon = \textit{epsf}$.

По количеству итераций метод `amsg2p` сравним с r -алгоритмом, а в ряде случаев и превосходит его. Это подтверждают результаты тестовых экспериментов из [94], где рассматривались 7 известных тестовых задач безусловной минимизации гладких и негладких выпуклых функций [52] (стр. 279–282) и кусочно-квадратичная функция [130] (стр. 176).

На рис. 3.6 приведены количества итераций метода `amsg2p` и программной реализации r -алгоритма, которую выполнил Д.Л. Крошко, для пяти тестовых примеров из [52] (их номера находятся под столбцами диаграммы). Количество переменных в тестовых примерах было от 5 до 50. Все примеры решались r -алгоритмом с критериями останова $\varepsilon_x = 10^{-6}$ и $\varepsilon_g = 10^{-6}$ и методом `amsg2p` при достаточно малых $\varepsilon_f = 10^{-8}$ и $\varepsilon_f = 10^{-12}$. Из диаграммы видно, что для

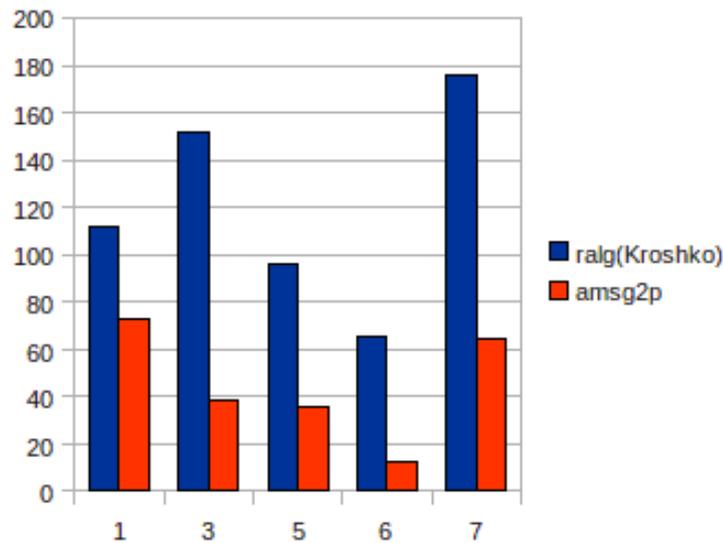


Рис. 3.6. Сравнение *amsg2p* и *r*-алгоритма в реализации Д.Л. Крошко для пяти тестовых примеров из монографии [52, с. 279–282]

четырёх тестовых примеров из пяти метод *amsg2p* по количеству итераций оказался более чем в два раза эффективнее *r*-алгоритма.

Методы *amsg2p* и *amsg2p* оказались намного эффективнее, чем метод Поляка без преобразования пространства [25]. Число итераций для них увеличивается слабо при значительном уменьшении ε . Это подтверждает, что преобразования пространства переменных, направленные на уменьшение степени вытянутости поверхностей уровня выпуклых функций, способны для овражных функций значительно ускорить сходимость субградиентных методов с шагом Поляка.

3.3 Метод нахождения допустимой точки выпуклого неравенства

Рассматривается метод фейеровского типа с преобразованием пространства для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства. Приведены вычислительная схема метода и теоремы о его сходимости.

Постановка задачи. Пусть имеется неравенство:

$$f(x) \leq 0, \quad (3.10)$$

где $f(x)$ – выпуклая функция векторного аргумента $x \in E^n$. Здесь E^n – евклидово пространство размерности n со скалярным произведением (x, y) , $x \in E^n$, $y \in E^n$. Неравенство (3.10) называется выпуклым неравенством.

Пусть X^* – множество допустимых точек (решений) выпуклого неравенства (3.10), т.е.

$$X^* = \{x : f(x) \leq 0\}. \quad (3.11)$$

Какова структура множества X^* и какое влияние она оказывает на методы для нахождения решений неравенства (3.10)? Выделим три случая, каждый из которых в значительной степени определяет требования к методам:

$X^* = \emptyset$ – множество X^* может быть пустым, означает, что неравенство (3.10) не имеет решений. В этом случае требуется обеспечить выполнение достаточных условий, которые дают основания утверждать, что $X^* = \emptyset$.

$X^* \equiv x^*$ – множество X^* может состоять из единственной точки x^* , т.е. неравенство (3.10) имеет единственное решение. Этот случай является трудным для вычислительных методов, особенно тогда, когда в окрестности x^* функция $f(x)$ имеет овражный характер.

$X^* \equiv M$ – неравенство (3.10) имеет много решений. Здесь множество $M \subset E^n$ – выпуклое и замкнутое, а если для функции $f(x)$ выполняется $\lim_{\|x\| \rightarrow +\infty} f(x) = +\infty$, то оно еще и ограниченное. Этот случай часто проще для методов, чем предыдущий, так как речь идет о нахождении некоторой точки из множества, имеющего внутренние точки.

Задача нахождения допустимой точки неравенства (3.10) эквивалентна следующей задаче оптимизации:

$$\min_{x \in E^n} F(x), \quad \text{где } F(x) = \max\{f(x), 0\}. \quad (3.12)$$

Здесь $F(x)$ – выпуклая функция векторного аргумента $x \in E^n$, как результат взятия функции максимума от двух выпуклых функций. Пусть F^* – минимальное значение функции $F(x)$. Тогда $F^* > 0$ – равносильно случаю $X^* = \emptyset$, а $F^* = 0$ – задает два других случая и при этом множество минимумов функции $F(x)$ совпадает с X^* . Для нахождения $x^* \in X^*$ можно использовать методы безусловной минимизации выпуклых функций.

В силу большого количества существующих методов безусловной минимизации выпуклых функций, казалось бы нет никаких проблем для нахождения допустимой точки неравенства (3.10), и вопрос нахождения $x^* \in X^*$ связан со сходимостью того или иного метода применительно к задаче (3.12). Как правило, значительную проблему для методов минимизации выпуклых функций представляют существенно овражные функции $f(x)$, т.е. когда поверхности уровня функции $f(x)$ имеют сильно выраженную овражную структуру. Поэтому интерес представляет разработка методов для нахождения решений выпуклого неравенства, которые бы устойчиво работали для негладких выпуклых функций, в том числе и существенно овражной структуры. В какой-то мере этому требованию удовлетворяет предлагаемый ниже метод `feg2p1`.

В силу конечности разрядной сетки вопрос о нахождении допустимой точки выпуклого неравенства будем рассматривать в зависимости от точности, с которой обеспечивается выполнение неравенства (3.10).

Пусть множество X^* не пустое. Для $\varepsilon_f > 0$, обозначим

$$X_{\varepsilon_f}^* = \{x : f(x) \leq \varepsilon_f\}. \quad (3.13)$$

Точку $\bar{x} \in X_{\varepsilon_f}^*$ будем считать ε_f -допустимым по функционалу решением (ε_f -решением) неравенства (3.10), т.е. в любой точке из $X_{\varepsilon_f}^*$ неравенство (3.10) нарушается не больше чем на величину, равную ε_f . При $\varepsilon_f = 0$ множество $X_{\varepsilon_f}^*$ совпадает с X^* по его определению согласно (3.11).

Кратко о методе `feg2p1`. Метод `feg2p1` предназначен для нахождения ε_f -решения неравенства (3.10) и обеспечивает хорошую скорость сходимости при малых значениях параметра ε_f для существенно овражных функций. Он дает конкретные ответы, к какому бы из приведенных выше трех случаев множество X^* ни относилось. Случай $X^* = \emptyset$ для метода `feg2p1` реализован посредством получения достаточного условия, что в шаре радиуса r_0 с центром в стартовой точке x_0 нет ни одной точки из множества X^* . Когда $X^* \equiv M$, то метод находит точку, в которой значение $f(x)$ в точности равно нулю. В обоих случаях параметр ε_f большой роли не играет. Только когда $X^* = x^*$ точность нахождения решения зависит от использования величин

ны ε_f . Для метода `feg2p1` можно использовать достаточно малые значения параметра ε_f , скажем $\varepsilon_f \sim 10^{-12} - 10^{-25}$. Более того, можно использовать и значения $\varepsilon_f \sim 10^{-25} - 10^{-40}$. По наблюдениям автора, при таких очень малых для ограниченной по разрядности компьютерной арифметики значениях параметра ε_f метод ведет себя устойчиво, даже если функция имеет существенно вытянутые поверхности уровня.

Метод `feg2p1` является итерационным методом первого порядка (использует значение функции $f(x)$ и субградиент $\partial f(x)$ в точке) и при обосновании сходимости используется следующее свойство субградиента $\partial f(x)$ выпуклой функции $f(x)$:

$$(x - x^*, \partial f(x)) \geq f(x), \quad (3.14)$$

которое справедливо для $\forall x \in E^n$ и для $\forall x^* \in X^*$.

Метод `feg2p1` относится к классу субградиентных методов в преобразованном линейном оператором пространстве переменных. В названии метода автор пытался передать содержательный смысл итерационного процесса, который поставлен в основу метода, в силу чего аббревиатура "`feg2p1`" была образована следующим принципом:

- f** – метод использует фейеровский (**F**ejer-type) шаг в направлении субградиента в преобразованном пространстве переменных на основе соотношения по типу (3.14);
- e** – метод основан на внешней аппроксимации множества допустимых точек монотонно уменьшающимся по объему эллипсоидом (**E**llipsoid), что реализовано с помощью однорангового эллипсоидального оператора;
- g2** – метод использует два (**2**) субградиента (**s**ub**G**radient), которые вычислены в последовательных точках процесса. Если угол между ними тупой, то субградиенты участвуют в преобразовании пространства переменных;
- p1** – для более сильного уменьшения объема эллипсоида, локализирующего множество допустимых точек, используется один (**1**) вектор агрегатного типа, который является линейной комбинацией с положительными

(Positive) коэффициентами вычисленных ранее субградиентов.

Преобразование пространства в методе feq2p1 направлено на улучшение структуры поверхностей уровня овражных функций в очередном преобразованном пространстве переменных, что обеспечивает для него вполне удовлетворительную скорость сходимости (по числу итераций) при работе с функциями, имеющими существенно вытянутые поверхности уровня.

Вычислительная схема метода feq2p1. Пусть для $\forall x \in E^n$ и для $\forall x^* \in X^*$ значение функции $f(x)$ и ее субградиента $\partial f(x)$ удовлетворяет следующему свойству:

$$(x - x^*, \partial f(x)) \geq \gamma f(x) \geq f(x), \quad (3.15)$$

где γ – некоторый скаляр ($\gamma \geq 1$)¹, который условимся называть показателем максимального сдвига по выпуклости функции $f(x)$. Параметр γ введен с той целью, чтобы метод учитывал особенности специальных классов функций, так, например, квадратичная выпуклая функция удовлетворяет свойству (3.15) с параметром $\gamma = 2$.

Входными параметрами метода будут: γ – показатель максимального сдвига по выпуклости функции $f(x)$; x_0 – начальная стартовая точка для процесса ($x_0 \in E^n$); r_0 – радиус шара $S(x_0, r_0)$ с центром в точке x_0 , в котором по предположению существует хотя бы одна точка из X^* ; ε_f – точность, с которой будет отыскиваться допустимая точка неравенства (3.10) по функционалу, $\varepsilon_f > 0$. Процесс вычислений будем останавливать, как только найдем ε_f -решение неравенства (3.10) (т.е. получена точка $x_k \in X_{\varepsilon_f}^*$), либо когда получено достаточное условие того, что нет допустимой точки в шаре $S(x_0, r_0)$. Первый случай будем идентифицировать как Останов($x_k \in X_{\varepsilon_f}^*$), а второй – как Останов($X^* \cap S(x_0, r_0) \equiv \emptyset$).

При описании вычислительной схемы будем использовать: знак „:=“ – для присвоения значений векторам и матрицам; знак „=“ – для присвоения значений скалярным переменным. Кроме того, будем придерживаться стандартных математических обозначений: (\cdot, \cdot) – для скалярного произведения; $(\cdot)^T$

¹По смыслу параметр γ аналогичен параметру m в соотношении (3.1).

– для транспонирования векторов и матриц; $\|\cdot\|$ – для норм векторов. Для обозначения векторов и матриц в ходе итерационного процесса использованы символы: x – вектор из E^n (используется для текущего приближения ε_f -решения); ξ, η, p – векторы из E^n (используются для нормированного субградиента в преобразованном пространстве, направления для преобразования пространства и нормированного агрегатного вектора); B – матрица размера $n \times n$ (задает оператор обратного преобразования пространства переменных); I_n – единичная матрица размера $n \times n$.

Пусть заданы: $\gamma, x_0, r_0^2, \varepsilon_f$ и пусть имеется процедура, которая в точке $\bar{x} \in E^n$ вычисляет значение функции $f(\bar{x})$ и компоненты ее субградиента $\partial f(\bar{x}) \in E^n$. Тогда вычислительная схема метода $feq2p1(\gamma, x_0, r_0, \varepsilon_f)$ принимает следующий вид.

Итерация 0 (Инициализация процесса). Вычислим $f(x_0)$ и $\partial f(x_0)$. Если $f(x_0) \leq \varepsilon_f$, то Останов($x_0 \in X_{\varepsilon_f}^*$). Если $\gamma^2(f(x_0))^2 > r_0^2 \|\partial f(x_0)\|^2$, то Останов($X^* \cap S(x_0, r_0) \equiv \emptyset$). В противном случае установим

$$h_0 = \frac{\gamma f(x_0)}{\|\partial f(x_0)\|}, \quad \xi_0 := \frac{\partial f(x_0)}{\|\partial f(x_0)\|}, \quad p_0 := 0, \quad B_0 := I_n$$

и перейдем к очередной итерации.

(k+1)-я итерация. Пусть на k -ой итерации получены $x_k \in E^n, r_k^2, h_k, \xi_k \in E^n, p_k \in E^n, B_k$ – матрица размера $n \times n$. Тогда выполним следующую последовательность операций:

Шаг 1. Вычислим очередное приближение

$$x_{k+1} := x_k - h_k B_k \xi_k$$

и квадрат радиуса шара в преобразованном пространстве переменных

$$r_{k+1}^2 = r_k^2 - h_k^2.$$

Шаг 2. Вычислим $f(x_{k+1})$ и $\partial f(x_{k+1})$. Если $f(x_{k+1}) \leq \varepsilon_f$, то Останов($x_{k+1} \in X_{\varepsilon_f}^*$). Если $\gamma^2 f^2(x_{k+1}) > r_{k+1}^2 \|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|^2$, то Останов($X^* \cap S(x_0, r_0) \equiv \emptyset$.) В противном случае положим

$$\xi_{k+1} := \frac{B_k^T \partial f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}, \quad h = \frac{\gamma f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}.$$

Шаг 3. Вычислим

$$\lambda_1 = -\frac{(p_k, \xi_{k+1})}{\sqrt{(p_k, \xi_{k+1})^2 + (\xi_k, \xi_{k+1})^2}}, \quad \lambda_2 = -\frac{(\xi_k, \xi_{k+1})}{\sqrt{(p_k, \xi_{k+1})^2 + (\xi_k, \xi_{k+1})^2}}$$

и положим

$$p := \begin{cases} \lambda_1 p_k + \lambda_2 \xi_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 > 0; \\ p_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0; \\ \xi_k, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 > 0; \\ 0, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0. \end{cases}$$

Шаг 4. Если $(p, \xi_{k+1}) \geq 0$, полагаем

$$B_{k+1} := B_k; \quad h_{k+1} = h; \quad p_{k+1} := 0$$

и переходим к шагу 5. Иначе вычисляем

$$\eta := \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (p, \xi_{k+1})^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{(p, \xi_{k+1})}{\sqrt{1 - (p, \xi_{k+1})^2}} p,$$

$$B_{k+1} := B_k (I_n + \eta \xi_{k+1}^T), \quad h_{k+1} = \frac{h}{\sqrt{1 - (p, \xi_{k+1})^2}},$$

$$p_{k+1} := \frac{1}{\sqrt{1 - (p, \xi_{k+1})^2}} (p - (p, \xi_{k+1}) \xi_{k+1}).$$

Шаг 5. Переходим к очередной итерации с x_{k+1} , r_{k+1}^2 , h_{k+1} , ξ_{k+1} , p_{k+1} и B_{k+1} .

Что можно сказать о сходимости метода? Пусть $X_1^* = X^* \cap S(x_0, r_0)$. Тогда для метода `feg2p1` справедливы следующие теоремы.

Теорема 3.4 [67]. Пусть $X_1^* \neq \emptyset$ и выполнено условие (3.15). Тогда генерируемая методом `feg2p1`($\gamma, x_0, r_0, \varepsilon_f$) последовательность $\{x_{k+1}\}_{k=0}^\infty$ удовлетворяет неравенству

$$\|B_{k+1}^{-1}(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|B_k^{-1}(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{\gamma f(x_k)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

для любой точки $x^* \in X_1^*$.

Теорема 3.5 [67]. Пусть на каждом шаге метода `feg2p1`($\gamma, x_0, r_0, \varepsilon_f$) выполнены условия $\|B_k\| \leq c_1$ и $\|\partial f(x_k)\| \leq c_2$. Тогда не более чем за K -шагов,

где $K =] \left(\frac{c_1 c_2 r_0}{\gamma \varepsilon_f} \right)^2 [+ 1$, метод $feg2p1(\gamma, x_0, r_0, \varepsilon_f)$ заканчивает работу выполнением одного из условий:

- (i) найдено ε_f -решение неравенства (3.10);
- (ii) найдено $X_1^* = \emptyset$, если $X^* = \emptyset$.

Метод $feg2p1$ зарекомендовал себя эффективным (по числу итераций) при работе с овражными функциями, в том числе и негладкими [64, 60, 62, 67]. Он оказался достаточно устойчив по нахождению приближения к единственной точке минимума для овражных функций. Эти свойства метода $feg2p1$ определили то, что он положен в основу рассмотренных ниже методов решения плохообусловленных систем линейных уравнений.

3.4 Три метода решения системы линейных уравнений

Рассматриваются новые итерационные методы для решения системы линейных алгебраических уравнений. Их эффективность подтверждена численными экспериментами при решении плохообусловленных систем линейных уравнений с матрицей Гильберта.

Пусть имеется система линейных уравнений

$$Ax = b, \tag{3.16}$$

где A – заданная вещественная матрица размером $n \times m$, $b \in R^m$ – заданный вектор правых частей, $x \in E^n$ – вектор переменных, который требуется найти.

Множество решений системы (3.16) будем обозначать X^* . В частности, оно может быть и пустым ($X^* = \emptyset$), когда система (3.16) не имеет решений (несовместна). Когда $m = n$ и A – невырожденная матрица размером $n \times n$, тогда система (3.16) имеет единственное решение $x^* = A^{-1}b$, где A^{-1} – обратная к A матрица. В случае, если матрица A плохо обусловлена, то нахождение точки x^* , как правило, достаточно трудная задача.

Для удобства дальнейшего изложения систему линейных уравнений (3.16) будем рассматривать в следующем (тождественном) виде:

$$(a_i, x) = b_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (3.17)$$

где $a_i \in E^n$ – вектор-столбец, который получен транспонированием i -й строки матрицы A .

Рассмотрим три способа сведения задачи нахождения решения системы линейных уравнений (3.16) к задаче нахождения допустимой точки выпуклого неравенства:

1) найти допустимую точку следующего выпуклого неравенства:

$$f_1(x) = \|Ax - b\|^2 \leq 0. \quad (3.18)$$

Здесь $f_1(x)$ – гладкая выпуклая квадратичная функция, и для нее можно использовать значение параметра $\gamma = \gamma_1 = 2$. Субградиент $g_{f_1}(x)$ функции $f_1(x)$ вычисляется по формуле

$$g_{f_1}(x) = 2A^T(Ax - b); \quad (3.19)$$

2) найти допустимую точку следующего выпуклого неравенства:

$$f_2(x) = \sum_{i=1}^m |(a_i, x) - b_i| \leq 0, \quad (3.20)$$

где $|\cdot|$ – модуль (абсолютная величина) числа. Функция $f_2(x)$ – негладкая выпуклая функция и для нее следует использовать значение параметра $\gamma = \gamma_2 = 1$. Субградиент $g_{f_2}(x)$ функции $f_2(x)$ вычисляется согласно следующей формуле:

$$g_{f_2}(x) = \sum_{i=1}^m \delta_i a_i, \quad \text{где } \delta_i = \begin{cases} 1, & \text{если } (a_i, x) - b_i \geq 0; \\ -1, & \text{если } (a_i, x) - b_i < 0; \end{cases} \quad (3.21)$$

3) найти допустимую точку следующего выпуклого неравенства:

$$f_3(x) = \max_{i=1, \dots, m} |(a_i, x) - b_i| \leq 0, \quad (3.22)$$

где $f_3(x)$ – также негладкая выпуклая функция, для которой следует использовать $\gamma = \gamma_3 = 1$. Субградиент $g_{f_3}(x)$ функции $f_3(x)$ вычисляется по

формуле

$$g_{f_3}(x) = \delta_{i^*} a_{i^*}, \text{ где } \delta_{i^*} = \begin{cases} 1, & \text{если } (a_{i^*}, x) - b_i \geq 0; \\ -1, & \text{если } (a_{i^*}, x) - b_i < 0. \end{cases} \quad (3.23)$$

Здесь i^* – такой индекс из $i \in \{1, \dots, m\}$, при котором достигается максимум модуля линейной функции $(a_i, x) - b_i$. Если такой максимум неоднозначен, то можно выбрать любой из тех индексов, при котором он достигается (например, при программной реализации методов удобно выбирать первый или последний).

Содержательный смысл указанных сведений достаточно прозрачен. Так, например, функция $f_1(x)$ задает сумму квадратов невязок системы уравнений (3.16). Нахождение ε -решения выпуклого неравенства (3.18) равносильно требованию, чтобы сумма квадратов невязок была равной нулю или достаточно близка к нулю. Эта близость определяется самим значением параметра ε . Аналогично, функция $f_2(x)$ задает сумму модулей невязок, а функция $f_3(x)$ – максимум из модуля невязок. Естественно, что использование ε будет иметь различный смысл для каждой из указанных функций.

Заметим, что задачу нахождения решения системы линейных уравнений можно свести к задаче нахождения допустимой точки выпуклого неравенства и рядом других способов. Например, рассматривая в качестве функции линейную комбинацию с положительными коэффициентами квадратов невязок либо модулей невязок, или же функцию максимума от квадратов или модулей невязок, умноженных на положительные числа. Это позволяет построить и ряд других методов для решения системы линейных уравнений, которые могут иметь смысл, когда по-разному требуется выдержать точность выполнения уравнений в (3.17)). Ниже ограничимся только тремя вышеуказанными способами.

Если $X^* \neq \emptyset$, то каждое из выпуклых неравенств ((3.18), (3.20) или (3.22)) имеет допустимую точку, которая совпадает с решением системы линейных уравнений (3.16), когда оно единственно, или с одним из решений, когда система (3.16) имеет бесконечное число решений. Для нахождения ε -приближений к допустимым точкам этих неравенств можно использовать метод feg2p1 с те-

ми значениями параметра γ , которые указаны выше. В зависимости от того, какую из функций мы выберем, мы получим разные методы для нахождения решения системы линейных уравнений. Условимся эти методы называть по типу функции, т.е. методу (1) будет соответствовать выбор функции $f_1(x)$, методу (2) – функции $f_2(x)$ и методу (3) – функции $f_3(x)$.

Для реализации указанных методов необходимо выбрать начальную стартовую точку x_0 и радиус r_0 . При выборе r_0 следует учесть, что система линейных уравнений (3.16) может быть несовместной. В качестве начальной стартовой точки выберем $x_0 = (0, \dots, 0)$, тогда радиусу r_0 можно придать содержательный смысл, т.е. будем отыскивать такое решение системы линейных уравнений, чтобы его норма была меньше, чем r_0 ($\|x^*\| \leq r_0$). В том случае, когда система (3.16) несовместна, получим достаточное условие, что решения с такой нормой нет.

Входными параметрами методов (1)–(3) будут: r_0 – радиус шара с центром в точке $(0, \dots, 0)$, в котором по предположению существует хотя бы одно из решений системы (3.16), если она совместна; ε ($\varepsilon > 0$) – достаточно малое число, которое задает точность, с которой будет отыскиваться такое решение.

Следует отметить, что здесь ε определяет точность, с которой будет найдено ε -решение выпуклого неравенства по функционалу и, следовательно, оно будет иметь различный смысл в зависимости от вида функции. Так метод (1) будет останавливаться как только найдена точка в которой, сумма квадратов невязок меньше либо равна ε , метод (2) будет останавливаться, как только найдена точка, в которой сумма модулей невязок меньше либо равна ε , метод (3) будет останавливаться как только найдена точка, в которой максимальный модуль невязки меньше либо равен ε . Естественно, что при одном и том же ε метод (2) будет находить более точное решение, чем метод (3). Для того, чтобы для метода (1) обеспечить такую же точность, какую дает метод (2) при ε_0 , для него следует использовать значение $\varepsilon = \varepsilon_0^2$.

При описании вычислительной схемы методов будем использовать такие же обозначения, как и для метода feq2p1, т.е. „:=“ – для присвоения значе-

ний векторам и матрицам; „ $=$ “ – для присвоения значений скалярным переменным; (\cdot, \cdot) – для скалярного произведения; $(\cdot)^T$ – для транспонирования векторов и матриц; $\|\cdot\|$ – для норм векторов. Для обозначения векторов и матриц использованы такие символы: x – вектор из E^n (используется для текущего приближения ε -решения); ξ, η, p – векторы из E^n (используются для нормированного субградиента в преобразованном пространстве, направления для преобразования пространства и нормированного агрегатного вектора); B – матрица размером $n \times n$ (задает оператор обратного преобразования пространства переменных); I_n – единичная матрица размером $n \times n$.

Пусть заданы i, r_0^2, ε . Здесь $i \in \{1, 2, 3\}$. Тогда вычислительная схема метода (i) принимает следующий вид.

Итерация 0. Установим $x_0 := 0$. Вычислим $f_i(x_0)$ и $g_{f_i}(x_0)$. Если $f_i(x_0) \leq \varepsilon$, то Останов " x_0 – решение системы (3.16)". Если $\gamma^2(f_i(x_0))^2 > r_0^2 \|g_{f_i}(x_0)\|^2$, то Останов "система (3.16) не имеет решения с нормой r_0 ". Иначе установим

$$h_0 = \frac{\gamma_i f_i(x_0)}{\|g_{f_i}(x_0)\|}, \quad \xi_0 := \frac{g_{f_i}(x_0)}{\|g_{f_i}(x_0)\|}, \quad p_0 := 0, \quad B_0 := I_n$$

и перейдем к очередной итерации.

($k+1$)-я итерация. Пусть на k -й итерации получены $x_k \in E^n, r_k^2, h_k, \xi_k \in E^n, p_k \in E^n, B_k$ – матрица размером $n \times n$. Тогда выполним следующую последовательность операций.

Шаг 1. Вычислим

$$x_{k+1} := x_k - h_k B_k \xi_k \quad \text{и} \quad r_{k+1}^2 = r_k^2 - h_k^2.$$

Шаг 2. Вычислим $f_i(x_{k+1})$ и $g_{f_i}(x_{k+1})$. Если $f_i(x_{k+1}) \leq \varepsilon$, то Останов " x_{k+1} – решение системы (3.16)". Если $\gamma_i^2 f_i^2(x_{k+1}) > r_{k+1}^2 \|B_k^T g_{f_i}(x_{k+1})\|^2$, то Останов "система (3.16) не имеет решения с нормой r_0 ". Иначе положим

$$\xi_{k+1} := \frac{B_k^T g_{f_i}(x_{k+1})}{\|B_k^T g_{f_i}(x_{k+1})\|}, \quad h = \frac{\gamma_i f_i(x_{k+1})}{\|B_k^T g_{f_i}(x_{k+1})\|}.$$

Шаг 3. Вычислим

$$\lambda_1 = -\frac{(p_k, \xi_{k+1})}{\sqrt{(p_k, \xi_{k+1})^2 + (\xi_k, \xi_{k+1})^2}}, \quad \lambda_2 = -\frac{(\xi_k, \xi_{k+1})}{\sqrt{(p_k, \xi_{k+1})^2 + (\xi_k, \xi_{k+1})^2}}$$

и положим

$$p := \begin{cases} \lambda_1 p_k + \lambda_2 \xi_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 > 0; \\ p_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0; \\ \xi_k, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 > 0; \\ 0, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0. \end{cases}$$

Шаг 4. Если $(p, \xi_{k+1}) \geq 0$, полагаем

$$B_{k+1} := B_k; \quad h_{k+1} = h; \quad p_{k+1} := 0$$

и переходим к шагу 5. Иначе вычисляем

$$\eta := \left(\frac{1}{\sqrt{1-(p, \xi_{k+1})^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{(p, \xi_{k+1})}{\sqrt{1-(p, \xi_{k+1})^2}} p,$$

$$B_{k+1} := B_k (I_n + \eta \xi_{k+1}^T), \quad h_{k+1} = \frac{h}{\sqrt{1-(p, \xi_{k+1})^2}},$$

$$p_{k+1} := \frac{1}{\sqrt{1-(p, \xi_{k+1})^2}} (p - (p, \xi_{k+1}) \xi_{k+1}).$$

Шаг 5. Переходим к очередной итерации с x_{k+1} , r_{k+1}^2 , h_{k+1} , ξ_{k+1} , p_{k+1} и B_{k+1} .

Сходимость метода(i) $i \in \{1, 2, 3\}$ следует из теоремы 3.5.

Вычислительные эксперименты приведем для самого сложного случая, т.е. когда система линейных уравнений (3.16) имеет единственное решение и матрица A плохо обусловлена. В качестве таковой возьмем симметричную матрицу A размером $n \times n$ с коэффициентами $a_{ij} = 1/(i + j - 1)$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, n$ (такая матрица известна как матрица Гильберта). Степень обусловленности матрицы A ($\sigma(A) = \lambda_{max}(A)/\lambda_{min}(A)$) очень быстро растет с ростом n . Так, например, $\sigma(A) = 1.60246928E + 13$ при $n = 10$, $\sigma(A) = 2.55784886E + 18$ при $n = 13$ (указанные значения найдены с помощью фортрановской подпрограммы EIGEN из [53]). Решение системы линейных уравнений (с матрицей Гильберта) прямыми методами (метод Гаусса, метод квадратных корней) при $n = 13$ проблематично, а при $n = 14$ и т.д. – невозможно.

Рассмотренные выше методы оказались достаточно устойчивыми при нахождении решений систем линейных уравнений с матрицей Гильберта при

Таблица 3.4. Тестовые эксперименты для трех методов: $i = 1, 2, 3$

n	метод (1), $\varepsilon = 10^{-24}$		метод (2), $\varepsilon = 10^{-12}$		метод (3), $\varepsilon = 10^{-12}$	
	iter	$\ x_{iter}^1 - x^*\ $	iter	$\ x_{iter}^2 - x^*\ $	iter	$\ x_{iter}^3 - x^*\ $
10	67	1.63117E-04	127	1.92725E-05	272	1.72554E-04
15	46	1.73133E-04	155	2.80517E-05	358	1.91924E-04
20	62	1.12086E-04	156	1.07970E-04	437	2.09268E-04
25	98	2.64809E-04	178	6.10850E-05	424	3.02368E-04
30	104	1.28632E-04	188	1.21749E-04	503	3.49949E-04
35	76	2.14721E-04	222	5.74886E-05	546	2.81749E-04
40	124	1.07358E-04	211	9.40017E-05	564	4.06881E-04
45	116	1.43121E-04	211	1.19156E-04	584	5.67897E-04
50	124	1.95499E-04	255	5.23825E-05	680	4.08678E-04

значениях n , для которых уже невозможно вычислить и степень обусловленности матрицы A . В таблице приведены результаты экспериментов для $n = 10, 15, \dots, 50$. Здесь в качестве вектора b выбирался вектор, равный Ae , где $e = (1, \dots, 1)^T$. При этом система (3.16) имеет единственное решение $x^* = e = (1, \dots, 1)^T$. Для каждого метода (i) ($i \in \{1, 2, 3\}$) при указанном значении ε в таблице даны: $iter$ – число итераций, которые затрачены на поиск приближения к x^* ; $\|x_{iter}^i - x^*\|$ – норма отклонения найденного решения от точного решения.

Из таблицы видно, что все три метода находят достаточно точные приближения к x^* . При этом следует заметить, что метод (1) работает в условиях даже худшей обусловленности, чем у матрицы Гильберта. Так как он имеет дело с квадратичной функцией, которая определяется матрицей $H = A^T A$, то речь идет об обусловленности $\sigma(H) = \sigma^2(A)$.

3.5 Линейные операторы в квазиньютоновских методах

Анализируются линейные операторы преобразования пространства для двух квазиньютоновских методов: Давидона–Флетчера–Пауэлла и Бройдена–Флетчера–Шенно. Для этих методов дана геометрическая интерпретация градиентного шага в преобразованном пространстве переменных.

По своей структуре r -алгоритмы близки к методам квазиньютоновского типа в том смысле, что формулы пересчета симметричной матрицы в модифицированных вычислительных схемах r -алгоритмов [58] очень напоминают формулы пересчета аналогичных матриц в некоторых методах квазиньютоновского типа. Это означает, что как первые, так и вторые используют близкие антиовражные приемы, чем объясняется их эффективность при минимизации овражных функций. Однако, если геометрический смысл антиовражного приема в r -алгоритмах достаточно прозрачен (реализуется с помощью операции растяжения пространства в направлении разности двух последовательных субградиентов [34, с. 112]), то для квазиньютоновских методов, которые обычно интерпретируют с позиций методов ньютоновского типа или сопряженных направлений, это не совсем так. Рассмотрим геометрическую интерпретацию некоторых квазиньютоновских методов, используя соответствующие им линейные операторы преобразования пространства.

О квазиньютоновских методах. Для минимизации выпуклой дважды дифференцируемой функции $f(x)$ ($x \in X$, $X = E^n$, E^n – евклидово пространство размерности n) методы квазиньютоновского типа генерируют последовательность точек $\{x_k, k = 0, 1, 2, \dots\}$ по следующему правилу:

$$x_{k+1} = x_k - h_k H_k \nabla f(x_k), \quad (3.24)$$

где $\nabla f(x_k)$ – градиент $f(x)$ в точке x_k ; H_k – симметричная матрица размером $n \times n$; h_k – шаг, соответствующий минимуму $f(x)$ в направлении $-H_k \nabla f(x_k)$. Пересчет матрицы H от шага к шагу осуществляется с обязательным выполнением так называемого квазиньютоновского условия

$$H_{k+1} \left(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \right) = -h_k H_k \nabla f(x_k), \quad (3.25)$$

которое гарантирует, что $H_n \approx [\nabla^2 f(x^*)]^{-1}$, если $f(x)$ хорошо аппроксимируется квадратичной функцией

$$\varphi(x) = \frac{1}{2} \left(\nabla^2 f(x^*) (x - x^*), x - x^* \right) + f(x^*).$$

Любой из способов пересчета матрицы H , удовлетворяющий условию (3.25), однозначно определяет соответствующий этому способу квазиньютоновский

метод. Для метода Давидона – Флетчера – Пауэлла (ДФП-метод) пересчет матрицы H_{k+1} определен формулой

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k \Delta g_k (\Delta g_k)^T H_k}{(\Delta g_k, H_k \Delta g_k)} + h_k \frac{H_k g_k g_k^T H_k}{(\Delta g_k, H_k g_k)}, \quad (3.26)$$

а для метода Бройдена – Флетчера – Шенно (БФШ-метод) – формулой

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k g_k (\Delta g_k)^T H_k + H_k \Delta g_k g_k^T H_k}{(\Delta g_k, H_k g_k)} - \left(h_k - \frac{(\Delta g_k, H_k \Delta g_k)}{(\Delta g_k, H_k g_k)} \right) \frac{H_k g_k g_k^T H_k}{(\Delta g_k, H_k g_k)}. \quad (3.27)$$

Здесь $g_k = \nabla f(x_k)$ – градиент в точке, из которой осуществляется движение; $\Delta g_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ – разность градиентов в двух последовательных точках минимизирующей последовательности. Если на каждом шаге ДФП и БФШ-методов шаговый множитель h_k выбирается из условия минимума функции по направлению $-H_k \nabla f(x_k)$, то матрицы H_{k+1} , генерируемые каждым из методов, являются положительно определенными.

Два указанных метода являются наиболее используемыми на практике, причем некоторое предпочтение отдается БФШ-методу. Почему это так, попытаемся разобраться с помощью анализа линейных операторов, которые лежат в основе этих методов.

Линейные операторы в ДФП- и БФШ-методах. Для положительно определенной матрицы H_{k+1} квазиньютоновское условие можно записать так:

$$B_{k+1} B_{k+1}^T (\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)) = -h_k B_k B_k^T \nabla f(x_k), \quad (3.28)$$

где B_k и B_{k+1} – вещественные матрицы размером $n \times n$.

Пусть матрица $B_{k+1} = B_k T_k$, где T_k – неособенная матрица размером $n \times n$. Обозначим $g_k = B_k^T \nabla f(x_k)$, $g_{k+1} = B_{k+1}^T \nabla f(x_{k+1})$. Они являются градиентами функции $\varphi_k(y) = f(B_k y)$, определенной в преобразованном линейном оператором $A_k = B_k^{-1}$ пространстве переменных $Y_k = A_k X$.

Применительно к преобразованному пространству переменных Y_k квазиньютоновское условие (3.28) можно записать таким образом:

$$T_k T_k^T (g_{k+1} - g_k) = -h_k g_k. \quad (3.29)$$

Условие (3.29) выполняется как для однорангового оператора

$$\begin{aligned} T_1(g_k, g_{k+1}) &= \\ &= I - \left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} - \sqrt{\frac{h_k(g_k, g_k)}{(g_k, g_k - g_{k+1}) \|g_k\|}} \frac{g_k}{\|g_k\|} \right) \left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} \right)^T, \end{aligned} \quad (3.30)$$

так и для однорангового оператора

$$\begin{aligned} T_2(g_k, g_{k+1}) &= \\ &= I + \frac{g_k}{(g_k - g_{k+1}, g_k)} \left(\sqrt{\frac{h_k(g_k, g_k - g_{k+1})}{(g_k, g_k)}} g_k + g_{k+1} - g_k \right)^T. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Оператор $T_1(g_k, g_{k+1})$ будем называть ДФП-оператором [63], так как он обеспечивает пересчет матрицы H_{k+1} согласно (3.26), а оператор $T_2(g_k, g_{k+1})$ будем называть БФШ-оператором, так как он соответствует пересчету матрицы H_{k+1} по формуле (3.27). Отметим, что здесь речь идет об операторах, обратных к операторам преобразования пространства переменных (именно они используются в вычислительных схемах методов переменной метрики). Преобразование пространства переменных реализуется для ДФП-метода согласно оператору $T_1^{-1}(g_k, g_{k+1})$, а для БФШ-метода – согласно оператору $T_2^{-1}(g_k, g_{k+1})$.

Некоторые свойства ДФП- и БФШ-операторов. Рассмотрим один шаг, связанный с переходом из преобразованного пространства переменных Y_k в очередное преобразованное пространство переменных $Y_{k+1} = T_k^{-1}Y_k$. Градиенты функции $\varphi_k(y)$ в двух последовательных точках y_k и y_{k+1} преобразованного пространства переменных Y_k будем обозначать как и раньше: g_k и g_{k+1} . Здесь точка y_{k+1} получена согласно шагу наискорейшего спуска h_k (как правило, приближенного) в направлении $-g_k$ из точки y_k . Точный шаг наискорейшего спуска будем обозначать h_k^* , в этом случае $(g_k, g_{k+1}) = 0$.

1. При переходе в очередное преобразованное пространство переменных $Y_{k+1} = T_k^{-1}Y_k$ пространство градиентов функции $\varphi_{k+1}(y)$ пересчитывается по формуле $\nabla \varphi_{k+1}(y) = T_k^T \nabla \varphi_k(y)$. Поэтому градиент, по которому будет осуществляться процесс спуска в преобразованном пространстве переменных

Y_{k+1} , для ДФП-метода будет иметь вид

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{k+1} &= \frac{(g_{k+1}, g_{k+1} - g_k)}{\|g_{k+1} - g_k\|^2} g_k + \frac{(g_k, g_k - g_{k+1})}{\|g_{k+1} - g_k\|^2} g_{k+1} + \\ &\quad + \sqrt{\frac{h_k(g_k, g_{k+1})^2}{(g_k, g_k - g_{k+1})}} \cdot \frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} \sim \\ &\sim \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_k + \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_{k+1}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

а для БФШ-метода

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{k+1} &= \frac{(g_k, g_k)}{(g_k - g_{k+1}, g_k)} g_{k+1} + \\ &\quad + \frac{(g_k, g_{k+1})}{(g_k - g_{k+1}, g_k)} \left(\sqrt{\frac{h_k(g_k, g_k - g_{k+1})}{(g_k, g_k)}} - 1 \right) g_k \sim g_{k+1}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

При точной реализации наискорейшего спуска для ДФП-метода \tilde{g}_{k+1} в точности совпадает с минимальной по норме выпуклой комбинацией градиентов g_k и g_{k+1} , а для БФШ-метода \tilde{g}_{k+1} совпадает с g_{k+1} . Этим обстоятельством в какой-то мере объясняется практическое превосходство БФШ-метода над ДФП-методом. Дело в том, что преобразование пространства, которое переводит градиент в кратчайший вектор выпуклой комбинации двух последовательных градиентов, более чувствительно к точности процедуры наискорейшего спуска (особенно когда нормы векторов g_k и g_{k+1} сильно различаются), чем преобразование пространства, которое сохраняет неизменяющимся последний вычисленный градиент.

2. Направление движения в Y_k из точки $y_{k+1} = B_k^{-1}x_{k+1}$, которое будет соответствовать направлению движения в Y_{k+1} по градиенту \tilde{g}_{k+1} , определяется по формуле $p_{k+1} = T_k T_k^T g_{k+1} = T_k \tilde{g}_{k+1}$. Для ДФП-метода

$$\begin{aligned} p_{k+1} &= \frac{(g_{k+1}, g_{k+1} - g_k)}{\|g_{k+1} - g_k\|^2} g_k + \frac{(g_k, g_k - g_{k+1})}{\|g_{k+1} - g_k\|^2} g_{k+1} + \\ &\quad + \frac{h_k(g_k, g_{k+1})}{(g_k, g_k - g_{k+1})} g_k \sim \\ &\sim \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_k + \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_{k+1}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

а для БФШ-метода

$$\begin{aligned}
p_{k+1} &= \frac{(g_k, g_k)}{(g_k - g_{k+1}, g_k)} g_{k+1} + \\
&+ \left(\frac{h_k(g_k, g_{k+1})}{(g_k, g_k)(g_k - g_{k+1}, g_k)} + \frac{(g_k, g_k) \cdot (g_{k+1} - g_k, g_{k+1})}{(g_k - g_{k+1}, g_k)^2} \right) g_k \sim \\
&\sim g_{k+1} + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2} g_k.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Из формул (3.34), (3.35) видим, что при точном наискорейшем спуске для обоих методов направление движения совпадает с направлением кратчайшей выпуклой комбинации двух последовательных градиентов (свойство сопряженных направлений). Однако, если для ДФП-метода p_k в точности равен кратчайшему вектору, то для БФШ-метода – с точностью до некоторого множителя.

3. Практическая эффективность квазиньютоновских методов (в общем случае – методов переменной метрики в H -форме) во многом зависит от того, насколько хорошо сохраняется положительная определенность матрицы H_k на каждом шаге. Для указанных методов при достаточно точной реализации наискорейшего спуска теоретически это не представляет проблем. Однако при минимизации овражных функций ошибки вычислений будут по-разному влиять на положительную определенность матриц H_k .

Рассмотрим определители матриц обратных преобразований: для ДФП-оператора

$$\det(T_1(g_k, g_{k+1})) = \sqrt{h_k \frac{(g_k, g_k - g_{k+1})}{\|g_{k+1} - g_k\|^2}} \sim \sqrt{h_k^* \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2}}, \tag{3.36}$$

для БФШ-оператора

$$\det(T_2(g_k, g_{k+1})) = \sqrt{h_k \frac{(g_k, g_k)}{(g_k, g_k - g_{k+1})}} \sim \sqrt{h_k^*}. \tag{3.37}$$

Из формул (3.36), (3.37) следует, что БФШ-метод должен обеспечивать численно более устойчивый пересчет матрицы H_{k+1} , чем ДФП-метод, так как он лучше сохраняет положительную определенность матрицы H_{k+1} при небольшом шаге h_k^* .

4. И, наконец, рассмотрим такую характеристику, как изменение угла между последовательными градиентами при переходе в преобразованное пространство переменных Y_{k+1} . Для указанных методов при точном наискорейшем спуске угол уменьшается от $\pi/2$ к острому ψ_k , косинус которого для ДФП-метода определяется из условия

$$\cos \psi_k = \left(\frac{\tilde{g}_k}{\|\tilde{g}_k\|}, \frac{\tilde{g}_{k+1}}{\|\tilde{g}_{k+1}\|} \right) = 1 / \sqrt{1 + h_k^* \frac{\|g_k\|^2 + \|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}},$$

а для БФШ-метода – из условия

$$\cos \psi_k = \left(\frac{\tilde{g}_k}{\|\tilde{g}_k\|}, \frac{\tilde{g}_{k+1}}{\|\tilde{g}_{k+1}\|} \right) = 1 / \sqrt{1 + h_k^* \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2}}.$$

Уменьшение угла между последовательными градиентами свойственно и для итерации r -алгоритмов при минимизации гладких функций. Так оператор растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов с коэффициентом α ($\alpha > 1$) преобразует прямой угол в острый ψ_k , косинус которого равен

$$\cos \psi_k = (\alpha^2 - 1) / \sqrt{\alpha^4 + \alpha^2 \left(\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2} + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2} \right) + 1} \leq 1 - \frac{2}{\alpha^2 + 1}.$$

Поэтому можно считать, что преобразование пространства в ДФП- и БФШ-методах имеют такую же направленность, как и в r -алгоритмах, т. е. «расширяется» конус возможных направлений убывания функции в преобразованном пространстве переменных.

Для минимизации выпуклых функций ДФП- и БФШ-операторы позволяют строить методы переменной метрики по типу r -алгоритмов с тем, чтобы уменьшить степень вытянутости поверхностей функции в преобразованном пространстве переменных. При этом методы в B -форме (корректируется матрица обратного преобразования) всегда гарантируют положительную определенность $B_k B_k^T$ и, как следствие, будут численно более устойчивыми, чем методы в H -форме.

3.6 Основные результаты раздела 3

В разделе описаны новые субградиентные методы с преобразованием пространства для минимизации негладких выпуклых функций, ориентированные на работу с овражными функциями. Исследована их связь с r -алгоритмами. Кратко основные научные результаты раздела можно сформулировать следующим образом.

1. Построены методы `amsg2` и `amsg2p` – новые субградиентные методы с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при априорном знании оптимального значения функции, имеющие ускоренную сходимость при решении овражных задач. Оба метода используют регулировку шага, известную как шаг Поляка или шаг Агмона-Моцкина-Шенберга, и преобразуют пространство переменных с помощью однорангового эллипсоидального оператора. В методе `amsg2` пространство преобразуется на основе двух последовательных субградиентов, если угол между ними тупой. В методе `amsg2p` для преобразования пространства используются два последовательных субградиента и агрегатный вектор, который является выпуклой комбинацией вычисленных ранее субградиентов. Если с помощью агрегатного вектора усилить преобразование пространства нельзя, то агрегатный вектор автоматически обновляется. Метод `amsg2p` оказывает действенную конкуренцию r -алгоритму Шора-Журбенко, что подтверждено результатами численных экспериментов для стандартного набора тестовых задач минимизации гладких и негладких выпуклых функций.
2. Разработан алгоритм `feg2p1` для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства или проверки существования допустимой точки. Алгоритм `feg2p1` построен на основе метода `amsg2p`, который дополнен критерием останова на основе расходимости суммы ряда, положительные члены которого получены в результате использования сдвига по выпуклости минимизируемой функции. Алгоритм `feg2p1` использован для построе-

ния трех итерационных методов нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений. Эффективность разработанных методов подтверждена численными экспериментами при решении плохообусловленных систем линейных уравнений с матрицей Гильберта.

3. Найдены ДФП- и БФШ-операторы (линейные операторы преобразования пространства для двух квазиньютоновских методов: Давидона–Флетчера–Пауэлла и Бройдена–Флетчера–Шенно). Для этих методов приведена геометрическая интерпретация градиентного шага в преобразованном пространстве переменных. Для минимизации выпуклых функций ДФП- и БФШ-операторы позволяют строить методы с преобразованием пространства по типу r -алгоритмов с тем, чтобы уменьшить степень вытянутости поверхностей функции в преобразованном пространстве переменных.

Результаты опубликованы в шести² статьях (из них 4 в фаховых изданиях), препринте³ и докладывались на восьми⁴ конференциях различного уровня.

²[65] Стецюк П.И. Линейные операторы в квазиньютоновских методах // Теория и приложения методов оптимизации. – Киев: Ин-т кибернетики им В.М.Глушкова НАН Украины, 1998. – С. 3–8. [67] Стецюк П.И. Об одном методе для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2000. – С. 3–10. [69] Стецюк П.И. К методам решения плохообусловленных систем линейных уравнений // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2001. – С. 9–15. [94] Стецюк П.И. Субградиентные методы переменной метрики, использующие шаг Агмона-Мозкина и одноранговый эллипсоидальный оператор // Труды АТИК -- 2007-2008. – Кишинэу: Эврика, 2009. – Т. I (XII). – С. 16–25. [114] Стецюк П.И. Ускорение субградиентного метода Поляка // Теорія оптимальних рішень. – 2012. – №11. – С. 151–160. [115] Стецюк П.И. Ускоренные модификации субградиентного метода Поляка для овражных выпуклых функций // В книге Стохастическое программирование и его приложения / П.С. Кнопов, В.И. Зоркальцев, Я.М. Иванько и др. -- Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. -- С. 160–184.

³[25] Журьбенко М.Г., Стецюк П.И. Субградиентні методи змінної метрики для розв'язування яружних задач оптимізації – Київ, 2009. – 27 с. – (Препр. / НАН України. Ін-т кибернетики імені В.М.Глушкова; 2009-3).

⁴[202] Stetsyuk P. Method FEG2P1 to Find ε -Solutions of Convex Inequalities // Thesis of U.S.-Ukrainian Workshop "Recent Advances in Non-Differentiable Optimization", (May, 15-18, 2000, Kyiv, Ukraine), P. 36. [71] Стецюк П.И. Об ускорении сходимости методов эллипсоидов // Труды XII Байкальской международной конференции (Иркутск, Байкал, 24 июня – 1 июля 2001 г.). Том 1. Математическое программирование. – Иркутск, 2001. – С. 61–66. [203] Stetsyuk P.I. On one interesting ellipsoid // Международная конференция, посвященная 65-летию со дня рождения Б.Н.Пшеничного. Тезисы докладов. – Киев: Издательство НТТУ "КПИ", 2002. – С.53-54. (Июнь 25-28, 2002, Киев, Украина). [106] Стецюк П.И. Метод `amsq2p` для овражных выпуклых функций // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. №12. Научное издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – С. 57–58. [110] Стецюк П.И. Субградиентные методы с преобразованием пространства для минимизации овражных выпуклых функций // Международная конференция „Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика“, посвященная 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко. Тезисы докладов. – Новосибирск, Академгородок, 2011. – С. 57. [113] Стецюк П.И. Ускоренные по Шору модификации субградиентного метода Поляка // Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии: материалы 3-й Междунар. науч. конф. (Кишинэу, 19–23 марта 2012 г.): Кишинэу: Эврика, 2012. -- С. 509–519. [207] Stetsyuk P. Polyak's accelerated subgradient method // 10th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization, 5–7 July 2012, Siauliai, Lithuania, p. 53. [117] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одном субградиентном методе с преобразованием пространства // Крымская Осенняя Математическая Школа (КРОМШ-2012). Двадцать третья ежегодная международная конференция. Тезисы докладов. – Симферополь: издательство КНЦ НАНУ, 2012. – С.65–66. (Крым, Ласпи-Батилиман, 17-29 сентября 2012).

Раздел 4

Алгоритмы уточнения двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах

В разделе описаны три способа улучшения двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах с булевыми $(0, 1)$ и бинарными (± 1) переменными и их применение для ряда задач.

В подразделе 4.1 рассмотрены два способа улучшения оценок с помощью семейств функционально избыточных квадратичных ограничений-равенств, которые для бинарных и булевых квадратичных задач можно построить при введении новых переменных в форме произведений уже существующих переменных [82, 85].

В подразделе 4.2 рассмотрен третий способ генерации квадратичных неравенств, который использует свойство нечетного количества (± 1) . Здесь же введен бинарный квадратичный многогранник $BiQP_n$ (для описания множества допустимых решений в задаче нахождения экстремума квадратичной функции от n бинарных переменных) и построена его полиэдральная аппроксимация сверху [102].

В подразделе 4.3 рассматриваются две новые двойственные оценки сверху для числа устойчивости графа и исследована их связь с оценками Н.З. Шора [86]. Показано, что обе оценки являются более точными верхними оценками, чем самая точная из оценок Шора.

В подразделе 4.4 рассматриваются три новые модели квадратичного типа для задачи о максимальном взвешенном разрезе графа (MaxCut-задача) [83]. Исследована связь соответствующих им оценок с известными верхними оценками Шора – Березовского (1995 г.) и Барахоны – Маджуба (1986 г.). Показано, что третья модель дает рекомендации для построения „усиленных“ аналогов оценки Барахоны-Маджуба в MaxCut-задачах.

4.1 Уточнение оценок в бинарных и булевых квадратичных задачах

Рассмотрены два способа построения функционально избыточных ограничений для улучшения лагранжевых двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах с бинарными (± 1) и булевыми $(0, 1)$ переменными.

Для уточнения лагранжевых двойственных верхних оценок важную роль играют функционально избыточные ограничения, которые являются нетривиальными следствиями из уже имеющихся ограничений, но в то же время не являются линейными комбинациями уже существующих ограничений. Такие ограничения не изменяют оптимального значения исходной квадратичной задачи. Однако их добавление к исходной квадратичной задаче приводит к новой функции Лагранжа и может оказаться, что новая лагранжева двойственная оценка есть более точной верхней оценкой, чем лагранжева двойственная оценка, которая соответствует исходной задаче.

Строить функционально избыточные ограничения можно по-разному. Так, например, в [142, 198, 200] для экстремальных задач на графах (максимальное устойчивое множество вершин графа, максимальный разрез графа и др.) исследованы различные семейства функционально избыточных квадратичных ограничений. Большинство из них ориентированы на учет специфических особенностей каждой конкретной задачи для того или иного семейства графов. Оказывается, этого неудобства можно избежать, используя простой прием „расширения“ множества бинарных (булевых) переменных. Он дает возможность генерировать функционально избыточные квадратичные ограничения-равенства, не обращая внимания на специфику задачи, для которой была сформулирована оптимизационная квадратичная модель.

Такой „автомат“ для генерации функционально-избыточных ограничений в бинарных и булевых квадратичных задачах будет обсуждаться ниже. Это будет сделано на примере простейших квадратичных задач, которые связаны с максимизацией квадратичной функции от n бинарных переменных (y_1, \dots, y_n) , каждая из которых может принимать значение либо $+1$, либо -1),

либо n булевых переменных x_1, \dots, x_n , каждая из которых может принимать значение либо 0, либо 1. Заметим, что ничего не изменится, если рассмотреть квадратичную задачу от бинарных (булевых) переменных в общем виде, т.е. при наличии квадратичных ограничений равенств или неравенств.

Простейшие бинарная и булева квадратичные задачи. Простейшая бинарная квадратичная задача рассматривается в такой формулировке:

$$Q_y^* = Q(y^*) = \max \left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} y_i y_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} y_i + q_{00} \right\} \quad (4.1)$$

при ограничениях:

$$y_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.2)$$

а простейшая булева квадратичная задача – в формулировке:

$$Q_x^* = Q(x^*) = \max \left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} x_i + q_{00} \right\} \quad (4.3)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.4)$$

Пусть Ψ_y^* и Ψ_x^* – наилучшие лагранжевые двойственные оценки, соответствующие задачам (4.1)–(4.2) и (4.3)–(4.4). Их можно найти с помощью решения задачи минимизации выпуклой недифференцируемой функции, определенной на параметрическом семействе неотрицательно определенных симметричных матриц (см. подраздел 1.3). Оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* служат оценками сверху для глобальных максимумов Q_y^* и Q_x^* , т.е. $\Psi_y^* \geq Q_y^*$, $\Psi_x^* \geq Q_x^*$. Однако, оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* не всегда являются достаточно хорошими верхними оценками для Q_y^* и Q_x^* . Так, например, для функций от двух переменных имеем

- 1) $Q(y) = -y_1 y_2 - y_1 - y_2 \implies Q_y^* = 1, \Psi_y^* = 1.5,$
- 2) $Q(y) = -y_1 y_2 - 2y_1 - y_2 \implies Q_y^* = 2, \Psi_y^* = 2.25,$
- 3) $Q(x) = -2x_1 x_2 + 3x_1 + 2x_2 \implies Q_x^* = 3, \Psi_x^* = 3.125,$
- 4) $Q(x) = -x_1 x_2 + x_1 + x_2, \implies Q_x^* = 1, \Psi_x^* = 1.125,$

и следовательно, для всех указанных примеров они есть неточными. Более того, в первом примере имеем наихудшую относительную точность оценки Ψ_y^* , которая составляет 50%.

Поэтому оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* нуждаются в уточнении. Сделать это можно за счет использования функционально избыточных ограничений. Далее будут рассмотрены более точные верхние оценки, чем оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* . Новые оценки получены благодаря использованию функционально избыточных ограничений, которые можно построить, если для задач (4.1)–(4.2) и (4.3)–(4.4) определенным образом расширить множество бинарных и булевых переменных.

Расширенные бинарная и булева квадратичные задачи. Для задачи (4.1)–(4.2) множество бинарных переменных расширим введением новых бинарных переменных $y_{ij} = y_i y_j$ для всех $i, j : 1 \leq i < j \leq n$. В результате получим „расширенную“ формулировку квадратичной задачи (4.1)–(4.2):

$$Q_y^* = Q(y^*) = \max \left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} y_i y_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} y_i + q_{00} \right\} \quad (4.5)$$

при ограничениях:

$$y_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.6)$$

$$\begin{cases} y_{ij} = y_i y_j, \\ y_{ij}^2 = 1, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.7)$$

Множество булевых переменных для задачи (4.3)–(4.4) будет расширено за счет введения новых булевых переменных $x_{ij} = x_i x_j$ для всех $i, j : 1 \leq i < j \leq n$. В результате получается „расширенная“ формулировка булевой квадратичной задачи (4.3)–(4.4):

$$Q_x^* = Q(x^*) = \max \left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} x_i + q_{00} \right\} \quad (4.8)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.9)$$

$$\begin{cases} x_{ij} = x_i x_j, \\ x_{ij}^2 - x_{ij} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.10)$$

Из способа построения расширенных квадратичных задач получаем справедливость следующей теоремы.

Теорема 4.1 *Наилучшие лагранжеские двойственные оценки для задач (4.5)–(4.7) и (4.8)–(4.10) удовлетворяют условиям:*

- (i) для задачи (4.5)–(4.7) оценка не больше, чем Ψ_y^* ,
(ii) для задачи (4.8)–(4.10) оценка не больше, чем Ψ_x^* .

Однако ожидать, что расширение множества переменных значительно улучшит точность лагранжевых двойственных оценок не приходится. Но „расширенные“ формулировки квадратичных задач позволяют описывать семейства функционально избыточных ограничений в форме квадратичных ограничений-равенств [82], добавление которых к задачам (4.5)–(4.7) и (4.8)–(4.10) может способствовать существенному уточнению лагранжевых двойственных оценок. Содержательный смысл этих семейств ограничений состоит в отражении различных видов „избыточных“ квадратичных зависимостей между новыми переменными y_{ij} и старыми переменными y_i для бинарной квадратичной задачи, и между новыми переменными x_{ij} и старыми переменными x_i для булевой квадратичной задачи.

Семейства функционально избыточных ограничений для расширенных бинарной и булевой задач. Для бинарных переменных имеем следующие семейства функционально избыточных ограничений.

- (а) Для каждой двойки бинарных переменных y_i, y_j имеем два ограничения

$$y_i - y_{ij}y_j = 0, \quad y_j - y_{ij}y_i = 0, \quad (4.11)$$

которые являются следствием очевидных равенств

$$y_i = y_i y_j^2 = (y_i y_j) y_j = y_{ij} y_j, \quad y_j = y_j y_i^2 = (y_i y_j) y_i = y_{ij} y_i$$

и справедливы при любых i и j , таких что $1 \leq i < j \leq n$.

- (b) Для каждой тройки бинарных переменных y_i, y_j и y_k имеем пять функционально избыточных ограничений. Первые три из них такие:

$$y_{ij} - y_{ik}y_{jk} = 0, \quad y_{ik} - y_{ij}y_{jk} = 0, \quad y_{jk} - y_{ij}y_{ik} = 0 \quad (4.12)$$

и являются следствием очевидных равенств

$$y_{ij} = y_i y_j = y_i y_j y_k^2 = (y_i y_k)(y_j y_k) = y_{ik} y_{jk},$$

$$y_{ik} = y_i y_k = y_i y_k y_j^2 = (y_i y_j)(y_j y_k) = y_{ij} y_{jk},$$

$$y_{jk} = y_j y_k = y_j y_k y_i^2 = (y_i y_j)(y_i y_k) = y_{ij} y_{ik},$$

которые, учитывая (4.2), справедливы при любых индексах i , j и k . Три ограничения (4.12) дополняются двумя ограничениями

$$y_{ij} y_k - y_{ik} y_j = 0, \quad y_{ij} y_k - y_{jk} y_i = 0, \quad (4.13)$$

которые следуют из неоднозначности представления произведения $y_i y_j y_k$:

$$y_i y_j y_k = (y_i y_j) y_k = y_{ij} y_k = (y_i y_k) y_j = y_{ik} y_j = (y_j y_k) y_i = y_{jk} y_i.$$

Заметим, что из неоднозначного представления $y_i y_j y_k$ следует три ограничения. Но одно из них является линейно зависимым от двух оставшихся ограничений, и не влияет на точность лагранжевой двойственной оценки.

(с) Для каждой четверки бинарных переменных y_i , y_j , y_k и y_l имеем два ограничения

$$y_{ij} y_{kl} - y_{ik} y_{jl} = 0, \quad y_{ij} y_{kl} - y_{il} y_{jk} = 0, \quad (4.14)$$

которые линейно независимы и следуют из неоднозначности представления произведения всех четырех переменных

$$y_i y_j y_k y_l = y_{ij} y_{kl} = y_{ik} y_{jl} = y_{il} y_{jk}.$$

По аналогичной схеме для булевых переменных можно выписать следующие семейства функционально избыточных ограничений.

(а) Для каждой двойки булевых переменных x_i , x_j имеем два ограничения

$$x_{ij} x_i - x_{ij} = 0, \quad x_{ij} x_j - x_{ij} = 0, \quad (4.15)$$

которые являются следствием равенств

$$0 = x_i^2 - x_i = (x_i^2 - x_i) x_j = x_i (x_i x_j) - x_i x_j = x_i x_{ij} - x_{ij} = 0,$$

$$0 = x_j^2 - x_j = (x_j^2 - x_j) x_i = x_j (x_i x_j) - x_i x_j = x_j x_{ij} - x_{ij} = 0,$$

и справедливы при любых i и j , таких что $1 \leq i < j \leq n$.

(b) Для каждой тройки булевых переменных x_i , x_j и x_k имеется пять ограничений. Первые три ограничения

$$x_{ij}x_{ik} - x_ix_{jk} = 0, \quad x_{ij}x_{jk} - x_jx_{ik} = 0, \quad x_{ik}x_{jk} - x_kx_{ij} = 0 \quad (4.16)$$

являются следствием очевидных равенств

$$0 = (x_i^2 - x_i)x_jx_k = (x_ix_j)(x_ix_k) - x_i(x_jx_k) = x_{ij}x_{ik} - x_ix_{jk} = 0,$$

$$0 = (x_j^2 - x_j)x_ix_k = (x_ix_j)(x_jx_k) - x_j(x_ix_k) = x_{ij}x_{jk} - x_jx_{ik} = 0,$$

$$0 = (x_k^2 - x_k)x_ix_j = (x_ix_k)(x_jx_k) - x_k(x_ix_j) = x_{ik}x_{jk} - x_kx_{ij} = 0,$$

которые, учитывая (4.4), справедливы при любых индексах i , j и k . Они точно также, как и в случае бинарных переменных, дополняются еще двумя такими ограничениями

$$x_{ij}x_k - x_{ik}x_j = 0, \quad x_{ij}x_k - x_{jk}x_i = 0, \quad (4.17)$$

следующими из неоднозначности представления

$$x_ix_jx_k = (x_ix_j)x_k = x_{ij}x_k = (x_ix_k)x_j = x_{ik}x_j = (x_jx_k)x_i = x_{jk}x_i.$$

(c) Для каждой четверки булевых переменных x_i , x_j , x_k и x_l имеем два ограничения

$$x_{ij}x_{kl} - x_{ik}x_{jl} = 0, \quad x_{ij}x_{kl} - x_{il}x_{jk} = 0, \quad (4.18)$$

которые линейно независимы и следуют из неоднозначности представления произведения четырех переменных

$$x_ix_jx_kx_l = x_{ij}x_{kl} = x_{ik}x_{jl} = x_{il}x_{jk}.$$

Семейства функционально избыточных ограничений (4.11)–(4.14) и (4.15)–(4.18) позволяют построить улучшенные бинарную и булеву квадратичные задачи, которым соответствуют более точные оценки, чем оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* .

Улучшенные бинарная и булева квадратичные задачи. Если квадратичную задачу (4.5)–(4.7) дополнить группами функционально избыточ-

ных ограничений (4.11), (4.12), (4.13) и (4.14), то получим новую квадратичную задачу в бинарных переменных:

$$Q_y^* = \max \left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} y_i y_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} y_i + q_{00} \right\} \quad (4.19)$$

при ограничениях

$$y_i^2 - 1 = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.20)$$

$$\begin{cases} y_{ij}^2 - 1 = 0, \\ y_i y_j - y_{ij} = 0, \\ y_{ij} y_i - y_j = 0, \\ y_{ij} y_j - y_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.21)$$

$$\begin{cases} y_{ij} y_k - y_{ik} y_j = 0, \\ y_{ij} y_k - y_{jk} y_i = 0, \\ y_{ik} y_{jk} - y_{ij} = 0, \\ y_{ij} y_{jk} - y_{ik} = 0, \\ y_{ij} y_{ik} - y_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n, \quad (4.22)$$

$$\begin{cases} y_{ij} y_{kl} - y_{ik} y_{jl} = 0, \\ y_{ij} y_{kl} - y_{il} y_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l : 1 \leq i < j < k < l \leq n. \quad (4.23)$$

Пусть ψ_y^* – наилучшая лагранжева двойственная оценка для задачи (4.19)–(4.23). Она всегда будет не хуже, чем оценка Ψ_y^* , а в ряде случаев будет более точной верхней оценкой для Q_y^* .

Аналогично, если квадратичную задачу (4.8)–(4.10) дополнить группами функционально избыточных ограничений (4.15), (4.16), (4.17) и (4.18), то получим новую квадратичную задачу в булевых переменных:

$$Q_x^* = \max \left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^n q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n q_{i0} x_i + q_{00} \right\} \quad (4.24)$$

при ограничениях

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.25)$$

$$\begin{cases} x_{ij}^2 - x_{ij} = 0, \\ x_i x_j - x_{ij} = 0, \\ x_{ij} x_i - x_j = 0, \\ x_{ij} x_j - x_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.26)$$

$$\begin{cases} x_{ij}x_k - x_{ik}y_j = 0, \\ x_{ij}x_k - x_{jk}y_i = 0, \\ x_{ik}x_{jk} - x_{ij}x_k = 0, \\ x_{ij}x_{jk} - x_{ik}x_j = 0, \\ x_{ij}x_{ik} - x_{jk}x_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n, \quad (4.27)$$

$$\begin{cases} x_{ij}x_{kl} - x_{ik}x_{jl} = 0, \\ x_{ij}x_{kl} - x_{il}x_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l : 1 \leq i < j < k < l \leq n. \quad (4.28)$$

Пусть ψ_x^* – наилучшая лагранжевая двойственная оценка для задачи (4.24)–(4.28). Она всегда будет не хуже, чем оценка Ψ_x^* , а в ряде случаев будет более точной верхней оценкой для Q_x^* .

Итак, новые квадратичные задачи в бинарных и булевых переменных получены дополнением простейших квадратичных задач (4.1)–(4.2) и (4.3)–(4.4) полными семействами функционально избыточных ограничений, которые рассмотрены выше. Ограничения (4.21) и (4.26) описывают связи внутри каждой двойки булевых и бинарных переменных. Их количество равно $2n(n-1)$. Ограничения (4.22) и (4.27) описывают дополнительные связи внутри каждой тройки булевых и бинарных переменных и их количество равно $5n(n-1)(n-2)/6$. Количество ограничений (4.23) и (4.28) равно $n(n-1)(n-2)(n-3)/12$ и они описывают дополнительные связи для переменных внутри каждой четверки булевых и бинарных переменных.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 4.2 *Оценки ψ_y^* и ψ_x^* (при произвольном $n \geq 4$) удовлетворяют следующим неравенствам*

$$Q_y^* \leq \psi_y^* \leq \Psi_y^*, \quad Q_x^* \leq \psi_x^* \leq \Psi_x^*.$$

Ее доказательство следует из теорем 1.6 и 4.2.

В заключение отметим, что неравенства в теореме 4.2 есть очень грубыми и рассчитаны на наихудшие случаи для бинарной и булевой квадратичных задач. На самом деле, в большинстве случаев оценки ψ_y^* и ψ_x^* будут более точными, чем оценки Ψ_y^* и Ψ_x^* . Так, например, для бинарной квадратичной задачи с $n = 4$, где $Q(y) = -y_1y_2 - y_1 - y_2 - y_3y_4 - y_3 - y_4$, имеем $Q_y^* = 2$,

$\Psi_y^* = 3$, $\psi_y^* = 2$. Для булевой квадратичной задачи с $n = 4$, где $Q(x) = -x_1x_2 + x_1 + x_2 - x_3x_4 + x_3 + x_4$, имеем $Q_x^* = 2$, $\Psi_x^* = 2.25$, $\psi_x^* = 2$. В обоих случаях оценки ψ_y^* и ψ_x^* являются точными.

4.2 Нечетное количество ± 1 и бинарный квадратичный многогранник

Исследованы свойства квадратичных неравенств для четного и нечетного количества бинарных переменных. Описано применение этих неравенств в бинарных и булевых квадратичных задачах. Для описания множества допустимых решений в задаче нахождения экстремума квадратичной функции от n бинарных переменных введен бинарный квадратичный многогранник $BiQP_n$ и построена его полиэдральная аппроксимация сверху.

Квадратичные неравенства для бинарных переменных. Пусть последовательность $l(k) = (l_1, \dots, l_k)$ состоит из $k \geq 2$ бинарных (± 1) чисел. Условимся ее называть бинарной последовательностью и будем использовать для нее еще и такое обозначение $l \in \{-1, 1\}^k$. Будем различать бинарную последовательность нечетной длины $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ и бинарную последовательность четной длины $l(2r) = (l_1, \dots, l_{2r})$. Здесь $r = 1, 2, \dots$ – натуральные числа.

Лемма 4.1 *Для произвольной бинарной последовательности нечетной длины $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ всегда справедливо квадратичное неравенство:*

$$S_{2r+1}^2 = \left(\sum_{i=1}^{2r+1} l_i \right)^2 = (l_1 + l_2 + \dots + l_{2r+1})^2 \geq 1. \quad (4.29)$$

Для заданного r количество всех возможных квадратичных неравенств (4.29) равно 4^r .

Доказательство. Легко видеть, что для бинарной последовательности нечетной длины $l(2r + 1)$ сумма всех ее членов $S_{2r+1} = l_1 + l_2 + \dots + l_{2r+1}$ не может быть равна нулю, так как S_{2r+1} получается в результате суммирования нечетного количества ± 1 . Самые близкие к нулю целые значения суммы S_{2r+1} такие: $S_{2r+1} = 1$, когда ровно $(r + 1)$ произвольных членов последовательности

$l(2r + 1)$ равны $+1$, а оставшиеся r ее членов равны -1 ; $S_{2r+1} = -1$, когда ровно r членов последовательности $l(2r + 1)$ равны $+1$ и оставшиеся $(r + 1)$ ее членов равны -1 .

Следовательно, для бинарной последовательности $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ всегда справедливо следующее квадратичное неравенство:

$$S_{2r+1}^2 = (l_1 + l_2 + \dots + l_{2r+1})^2 \geq (\pm 1)^2 = 1,$$

что доказывает неравенство (4.29).

Для заданного r количество последовательностей $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ равно $2^{2r+1} = 2 \cdot 4^r$. Однако, последовательность $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ и последовательность $l'(2r + 1) = (-l_1, \dots, -l_{2r+1})$ дают одно и то же неравенство (4.29). Следовательно, для заданного r количество всех возможных неравенств вида (4.29) равно 4^r . \square .

Пусть имеется вектор-строка $y = (y_1, \dots, y_k)$, которая состоит из k бинарных (± 1) переменных. Будем различать векторы $y \in \{-1, 1\}^{2r+1}$ с нечетным количеством бинарных переменных и векторы $y \in \{-1, 1\}^{2r}$ с четным количеством бинарных переменных, где $r = 1, 2, \dots$ – натуральные числа.

Лемма 4.2 *Для нечетного количества бинарных переменных $y \in \{-1, 1\}^{2r+1}$, $r = 1, 2, \dots$ и произвольной бинарной последовательности нечетной длины $l(2r + 1) = (l_1, \dots, l_{2r+1})$ справедливо квадратичное неравенство*

$$\left(\sum_{i=1}^{2r+1} l_i y_i \right)^2 \geq 1 \quad \text{или его аналог} \quad \sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_i y_j \geq -r. \quad (4.30)$$

Для четного количества бинарных переменных $y \in \{-1, 1\}^{2r}$, $r = 1, 2, \dots$, $l_0 = \pm 1$ и произвольной бинарной последовательности четной длины $l(2r) = (l_1, \dots, l_{2r})$ справедливо квадратичное неравенство

$$\left(l_0 + \sum_{i=1}^{2r} l_i y_i \right)^2 \geq 1 \quad \text{или его аналог} \quad \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_i y_j \geq -r. \quad (4.31)$$

Для заданного r количество всех возможных квадратичных неравенств как вида (4.30), так и вида (4.31), равно 4^r .

Доказательство. Первое неравенство в (4.30) следует из леммы 4.1, если ее применить к нечетной длины бинарной последовательности $l'(2r+1) = (l'_1, \dots, l'_{2r+1})$, члены которой получены по правилу: $l'_i = l_i y_i$, $i = 1, \dots, 2r+1$. Учитывая, что $l_i^2 = 1$ и $y_i^2 = 1$ для всех $i = 1, \dots, 2r+1$, правую часть первого неравенства из (4.30) можно записать так:

$$\left(\sum_{i=1}^{2r+1} l_i y_i \right)^2 = \sum_{i=1}^{2r+1} l_i^2 y_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_i y_j = 2r+1 + 2 \sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_i y_j.$$

Тогда первое неравенство в (4.30) можно переписать следующим образом

$$2r+1 + 2 \sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_i y_j \geq 1 \quad \text{или} \quad 2 \sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_i y_j \geq -2r,$$

откуда, после деления на 2, получаем второе квадратичное неравенство в (4.30).

По аналогичной схеме доказывается и (4.31). Так, первое неравенство в (4.31) следует из леммы 4.1, если ее применить к нечетной длины бинарной последовательности $l'(2r+1) = (l'_1, \dots, l'_{2r+1})$, члены которой получены по правилу: $l'_1 = l_0$ и $l'_{i+1} = l_i y_i$, $i = 1, \dots, 2r$. Учитывая, что $l_0^2 = 1$, $l_i^2 = 1$ и $y_i^2 = 1$ для всех $i = 1, \dots, 2r$, правую часть первого неравенства из (3) можно записать так:

$$\begin{aligned} \left(l_0 + \sum_{i=1}^{2r} l_i y_i \right)^2 &= l_0^2 + \sum_{i=1}^{2r} l_i^2 y_i^2 + 2 \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + 2 \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_i y_j \\ &= 2r+1 + 2 \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + 2 \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_i y_j. \end{aligned}$$

Тогда первое неравенство в (4.31) можно переписать следующим образом

$$2r+1 + 2 \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + 2 \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_i y_j \geq 1,$$

$$2 \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + 2 \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_i y_j \geq -2r,$$

откуда, после деления на 2, получаем второе квадратичное неравенство из (4.31).

Для одного и того же r ($r = 1, 2, 3, \dots$) квадратичным неравенствам (4.30) и (4.31) соответствуют пусть и различные, но одинаковой длины нечетные последовательности $l'(2r + 1) = (l'_1, \dots, l'_{2r+1})$. Поэтому, для заданного r количество всевозможных квадратичных неравенств как вида (4.30), так и вида (4.31) равно 4^r (следует из леммы 4.1). \square .

Примеры полных семейств квадратичных неравенств. Приведем полные семейства квадратичных неравенств, которые следуют из леммы 4.2, для двоек и троек бинарных переменных (им соответствует $r = 1$), четверок и пятерок бинарных переменных (им соответствует $r = 2$). Для удобства будем рассматривать бинарные переменные y_i, y_j, y_k, y_l, y_m , т.е. каждой бинарной переменной от первой до пятой припишем свой отдельный индекс.

Полные семейства квадратичных неравенств для двоек и троек бинарных переменных содержат по 4 различных неравенства. Для двоек бинарных переменных полное семейство квадратичных неравенств следует из (4.31) при $r = 1$ и включает неравенства

$$\left\{ \begin{array}{l} (+1 + y_i + y_j)^2 \geq 1, \\ (-1 + y_i + y_j)^2 \geq 1, \\ (+1 - y_i + y_j)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i - y_j)^2 \geq 1, \end{array} \right. \quad \text{или их аналоги} \quad \left\{ \begin{array}{l} +y_i + y_j + y_i y_j \geq -1, \\ -y_i - y_j + y_i y_j \geq -1, \\ -y_i + y_j - y_i y_j \geq -1, \\ +y_i - y_j - y_i y_j \geq -1. \end{array} \right. \quad (4.32)$$

Для троек бинарных переменных полное семейство квадратичных неравенств следует из (4.31) при $r = 1$ и включает неравенства

$$\left\{ \begin{array}{l} (+y_i + y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j - y_k)^2 \geq 1, \end{array} \right. \quad \text{или их аналоги} \quad \left\{ \begin{array}{l} +y_i y_j + y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j - y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j + y_i y_k - y_j y_k \geq -1, \\ +y_i y_j - y_i y_k - y_j y_k \geq -1. \end{array} \right. \quad (4.33)$$

Полные семейства квадратичных неравенств для четверок и пятерок бинарных переменных содержат по $16 = 4^2$ различных неравенств. Для четверок они следуют из (4.31) при $r = 2$, а для пятерок – из (4.30) при $r = 2$. Полные семейства квадратичных неравенств для четверок и пятерок бинарных переменных в форме первых неравенств из (4.31) и (4.30) включают

следующие 16 неравенств:

$$\left\{ \begin{array}{l} (+1 + y_i + y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (-1 + y_i + y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 - y_i + y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i - y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i + y_j - y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i + y_j + y_k - y_l)^2 \geq 1, \\ (-1 - y_i + y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (-1 + y_i - y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (-1 + y_i + y_j - y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (-1 + y_i + y_j + y_k - y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 - y_i - y_j + y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 - y_i + y_j - y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 - y_i + y_j + y_k - y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i - y_j - y_k + y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i - y_j + y_k - y_l)^2 \geq 1, \\ (+1 + y_i + y_j - y_k - y_l)^2 \geq 1, \end{array} \right. \quad \text{и} \quad \left\{ \begin{array}{l} (+y_i + y_j + y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j + y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j + y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j - y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j + y_k - y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j + y_k + y_l - y_m)^2 \geq 1, \\ (-y_i - y_j + y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j - y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j + y_k - y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j + y_k + y_l - y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j - y_k + y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j + y_k - y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j + y_k + y_l - y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j - y_k - y_l + y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j - y_k + y_l - y_m)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j + y_k - y_l - y_m)^2 \geq 1. \end{array} \right. \quad (4.34)$$

Аналоги квадратичных неравенств (4.34) приводить не будем в силу их громоздкости. Отметим лишь, что по мере увеличения r ($r = 3, 4, \dots$) полные семейства квадратичных неравенств приобретают громоздкую форму даже при их описании с помощью первых квадратичных неравенств из (4.31) и (4.30) в форме (4.34), которая использована для четверок и пятерок бинарных переменных. Так, например, при $r = 3$ (соответствует четным „шестеркам“ и нечетным „семеркам“ бинарных переменных) имеется $64 = 4^3$ неравенства. Форма (4.34) для них требует слишком много места, чтобы отразить все возможные комбинации ± 1 для шести- и семи-индексных бинарных переменных.

Описать полные семейства неравенств (4.30) и (4.31) для больших r можно в более экономной форме, но это не будет предметом обсуждения в работе.

Основные выводы из леммы 4.2. Отметим два центральных момента, которые следуют из леммы 4.2 для квадратичных экстремальных задач от n булевых $x \in \{0, 1\}^n$ или бинарных $y \in \{-1, 1\}^n$ переменных. Булева переменная $x_i \in \{0, 1\}$ описывается квадратичным равенством $x_i^2 = x_i$, а бинарная переменная $y_i \in \{-1, +1\}$ описывается квадратичным равенством

$y_i^2 = 1$. Принципиальной разницы между этими задачами нет. С помощью замены переменных $y_i = 1 - 2x_i$, $i = 1, \dots, n$ любую квадратичную экстремальную задачу с булевыми переменными можно свести к квадратичной экстремальной задаче с бинарными переменными (и наоборот).

Первый вывод из леммы 4.2: использование идеи нечетного количества ± 1 позволяет в квадратичных экстремальных задачах с бинарными (а значит и с булевыми) переменными автоматизировать построение дополнительных квадратичных неравенств, справедливых для всевозможных значений бинарных переменных $y \in \{-1, 1\}^n$ (либо булевых переменных $x \in \{0, 1\}^n$). В своем методе получения двойственных оценок Н.З.Шор такие неравенства называет функционально избыточными квадратичными ограничениями, так как они не изменяют множества допустимых решений в квадратичных экстремальных задачах с бинарными (булевыми) переменными [198, 136]. Двойственные алгоритмы для квадратичной экстремальной задачи, дополненной такими неравенствами, позволяют более точно аппроксимировать оптимальное значение целевой функции: сверху в задачах на максимум и снизу в задачах на минимум.

Для квадратичных экстремальных задач с бинарными переменными более удобной является первая форма неравенств (4.30) и (4.31) (для задач с булевыми переменными аналоги этой первой формы переписываются с учетом замены переменных $y_i = 1 - 2x_i$, $i = 1, \dots, n$). Первая форма определяется как полный квадрат от линейной комбинации бинарных переменных и для нее легко вычислять значение, которое принимает эта линейная комбинация при некотором заданном векторе $\bar{y} = (\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n)$. В двойственных алгоритмах это является существенным преимуществом, так как невязки ограничений в квадратичной задаче являются компонентами суб(супер)градиента негладких функций от неизвестных множителей Лагранжа.

Второй вывод из леммы 4.2 связан со второй формой неравенств в (4.30) и (4.31). В нем утверждается: использование второй формы квадратичных неравенств для четного и нечетного количества бинарных переменных поз-

воляет автоматизировать переход от квадратичных экстремальных задач с бинарными переменными к их линейным аналогам, которые получены релаксацией (ослаблением) бинарных переменных. На самом деле, вторые формы квадратичных неравенств в (4.30) и (4.31) фактически подготовлены для использования переменных $y_{ij} = y_i y_j$ и их можно записать в виде следующих линейных неравенств:

$$\sum_{i=1}^{2r} \sum_{j>i}^{2r+1} l_i l_j y_{ij} \geq -r \quad \text{и} \quad \sum_{i=1}^{2r} l_0 l_i y_i + \sum_{i=1}^{2r-1} \sum_{j>i}^{2r} l_i l_j y_{ij} \geq -r.$$

При $r = 1$ (соответствует тройкам и двойкам бинарных переменных) линейные неравенства приобретают следующий вид

$$\left\{ \begin{array}{l} +y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} \geq -1, \\ -y_{ij} - y_{ik} + y_{jk} \geq -1, \\ -y_{ij} + y_{ik} - y_{jk} \geq -1, \\ +y_{ij} - y_{ik} - y_{jk} \geq -1, \end{array} \right. \quad \text{и} \quad \left\{ \begin{array}{l} +y_i + y_j + y_{ij} \geq -1, \\ -y_i - y_j + y_{ij} \geq -1, \\ -y_i + y_j - y_{ij} \geq -1, \\ +y_i - y_j - y_{ij} \geq -1. \end{array} \right.$$

В теории математического программирования первая четверка линейных неравенств известна как правило „треугольника“, а вторая четверка линейных неравенств известна как самое простейшее правило для линеаризации квадратичных булевых задач. Это правило следует из релаксации бинарных переменных y_i и y_j :

$$y_i \in \{-1, 1\} \quad \Longrightarrow \quad -1 \leq y_i \leq 1 \quad \equiv \quad \left\{ \begin{array}{l} 1 + y_i \geq 0, \\ 1 - y_i \geq 0, \end{array} \right.$$

$$y_j \in \{-1, 1\} \quad \Longrightarrow \quad -1 \leq y_j \leq 1 \quad \equiv \quad \left\{ \begin{array}{l} 1 + y_j \geq 0, \\ 1 - y_j \geq 0, \end{array} \right.$$

и использовании для релаксированных переменных очевидных неравенств:

$$\left\{ \begin{array}{l} (1 + y_i)(1 + y_j) \geq 0, \\ (1 - y_i)(1 - y_j) \geq 0, \\ (1 - y_i)(1 + y_j) \geq 0, \\ (1 + y_i)(1 - y_j) \geq 0, \end{array} \right. \quad \Longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} +y_i + y_j + y_i y_j \geq -1, \\ -y_i - y_j + y_i y_j \geq -1, \\ -y_i + y_j - y_i y_j \geq -1, \\ +y_i - y_j - y_i y_j \geq -1. \end{array} \right.$$

При $r = 2$ (соответствует пятеркам и четверкам бинарных переменных), $r = 3$ (соответствует семеркам и шестеркам бинарных переменных) и т. д. линейные неравенства имеют аналогичный вид и их можно считать правилами „пятиугольника“, „семиугольника“ и т. д.

Ниже будет рассмотрено применение леммы 4.2 в рамках второго вывода, а именно будем использовать вытекающие из леммы семейства линейных неравенств для аппроксимации сверху некоторого многогранника, который построен по типу булевого квадратичного многогранника введенного М. Падбергом (Padberg M.W.) в [192].

Многогранники $BiQP_n$ и $BoQP_n$. Рассмотрим выпуклый многогранник

$$BiQP_n = \text{conv}\{(y, x) \in \{-1, 1\}^{n+\frac{n(n-1)}{2}} : x_{ij} = y_i y_j \forall (i, j) : 1 \leq i < j \leq n\}$$

и условимся его называть бинарным квадратичным многогранником (binary quadratic polytope). Он является выпуклой оболочкой всех возможных пар бинарных векторов $y \in \{-1, 1\}^n$ и $x \in \{-1, 1\}^{\frac{n(n-1)}{2}}$, где на компоненты вектора x наложены следующие ограничения: бинарная переменная x_{ij} равна 1 только тогда, когда обе бинарные переменные y_i и y_j одинаковы, и равна -1 только тогда, когда бинарные переменные y_i и y_j различные. Эти ограничения описываются с помощью функции $x_{ij} = y_i y_j$ (логическая функция два к двум), т.е. в двух случаях x_{ij} будет равно 1 (когда $y_i = y_j = 1$ и когда $y_i = y_j = -1$), а в двух случаях равно -1 (когда $y_i = 1$ и $y_j = -1$, и когда $y_i = -1$ и $y_j = 1$).

Другая логическая функция положена в основу булевого квадратичного многогранника (boolean quadratic polytope) Падберга (условимся его обозначать $BoQP_n$). Он определяется так:

$$BoQP_n = \text{conv}\{(x, y) \in \{0, 1\}^{n+\frac{n(n-1)}{2}} : y_{ij} = x_i x_j \forall (i, j) : 1 \leq i < j \leq n\}$$

и является выпуклой оболочкой всех возможных пар булевых векторов $x \in \{0, 1\}^n$ и $y \in \{0, 1\}^{\frac{n(n-1)}{2}}$, где ограничения на компоненты булевого вектора y определяются некоторой логической функцией один к трем. На самом деле, булева компонента y_{ij} равна единице только в одном случае, а именно, – когда обе булевы компоненты x_i и x_j равны единице. В трех оставшихся случаях она принимает значение, равное нулю.

Эти две различные по своей сути логические функции играют важную роль в теории графов. Так, например, с помощью многогранника $BiQP_n$ удобно описывать разрезы графа (ребрами связаны только вершины из двух различных

подмножеств вершин графа), а с помощью многогранника $BoQP_n$ – свойства отдельных подмножеств графа (ребрами связаны только вершины этого подмножества вершин графа).

Для многогранников $BiQP_n$ и $BoQP_n$ при значениях $n = 2, 3, 4, 5, 6$ с помощью программы Skeleton (<http://www.uic.nnov.ru/~zny/skeleton>) были построены неприводимые системы линейных неравенств [27]. Для описания многогранников $BiQP_5$ и $BoQP_5$ системы линейных неравенств включают по 368 неравенства, а для описания многогранников $BiQP_6$ и $BoQP_6$ – по 116764 неравенства и чтобы их найти потребовалось 30 минут счетного времени на процессоре Pentium M 1.60 GHz.

Аппроксимации многогранника $BiQP_n$. Легко видеть, что квадратичные неравенства леммы 4.2 очень подходят для верхней аппроксимации многогранника $BiQP_n$ с помощью многогранников, заданных семействами линейных неравенств для четных и нечетных подмножеств бинарных переменных $y \in \{-1, 1\}^n$. Действительно, с помощью переменных $x_{ij} = y_i y_j$ вторые формы квадратичных неравенств из (4.30) и (4.31) записываются в форме линейных неравенств. Все возможные линейные неравенства для нечетной длины последовательностей и всех $r \in 1, \dots, r_1$, где r_1 такое, что $2r_1 + 1 \leq n$, можно записать в следующем виде:

$$\sum_{j=1}^{2r} \sum_{k>j}^{2r+1} l_j l_k x_{ij i_k} \geq -r, \quad r=1, \dots, r_1, \quad \forall \left\{ \begin{array}{l} 1 \leq i_1 < \dots < i_{2r+1} \leq n, \\ l \in \{-1, 1\}^{2r+1} : l_1 = 1. \end{array} \right. \quad (4.35)$$

Неравенства (4.35) следуют из второй формы квадратичных неравенств (4.30). Все возможные линейные неравенства для четной длины последовательностей и всех $r \in 1, \dots, r_2$, где r_2 такое, что $2r_2 \leq n$, можно записать таким образом:

$$\sum_{j=1}^{2r} l_j y_{i_j} + \sum_{j=1}^{2r-1} \sum_{k>j}^{2r} l_j l_k x_{ij i_k} \geq -r, \quad r=1, \dots, r_2, \quad \forall \left\{ \begin{array}{l} 1 \leq i_1 < \dots < i_{2r} \leq n, \\ l \in \{-1, 1\}^{2r}. \end{array} \right. \quad (4.36)$$

Рассмотрим следующий многогранник

$$LBiQP_n(r_1, r_2) = \{(y, x) \in R^{n + \frac{n(n-1)}{2}} : (y, x) \text{ удовлетворяют (4.35) и (4.36)}\},$$

где r_1 и r_2 такие, что $2r_1 + 1 \leq n$ и $2r_2 \leq n$. Самый полный многогранник $LBiQP_n(r_1, r_2)$, где r_1 и r_2 принимают все возможные значения, условимся обозначать $LBiQP_n$. Этот многогранник реализуется для четных n при $r_1 = \frac{n}{2} - 1$ и $r_2 = \frac{n}{2}$, а для нечетных n при $r_1 = r_2 = \frac{n-1}{2}$.

Теорема 4.3 Многогранник $LBiQP_n(r_1, r_2)$ аппроксимирует сверху многогранник $BiQP_n$, его описание содержит $M(r_1, r_2) = \sum_{r=1}^{r_2} 4^r C_n^{2r} + \sum_{r=1}^{r_1} 4^r C_n^{2r+1}$ линейных неравенств. Описание многогранника $LBiQP_n$ содержит $M(n) = \frac{3^{n+1} + (-1)^n}{4} - (n+1)$ линейных неравенств: количество неравенств для четных n равно $\frac{3(3^n - 1)}{4} - n$, а для нечетных n равно $\frac{3^{n+1} - 5}{4} - n$.

Доказательство. Многогранник $BiQP_n$ можно задать с помощью следующей системы квадратичных равенств:

$$y_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad x_{ij} = y_i y_j, \quad x_{ij}^2 = 1 \quad \forall (i, j) : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.37)$$

Учитывая бинарность переменных $y \in \{-1, 1\}^n$, из леммы 4.2 следует, что множество решений системы (4.37) не изменится, если к ней прибавить семейство квадратичных неравенств

$$\sum_{j=1}^{2r} \sum_{k>j}^{2r+1} l_j l_k y_{i_j} y_{i_k} \geq -r, \quad r=1, \dots, r_1, \quad \forall \left\{ \begin{array}{l} 1 \leq i_1 < \dots < i_{2r+1} \leq n, \\ l \in \{-1, 1\}^{2r+1} : l_1 = 1, \end{array} \right. \quad (4.38)$$

где $2r_1 + 1 \leq n$, и семейство квадратичных неравенств

$$\sum_{j=1}^{2r} l_j y_{i_j} + \sum_{j=1}^{2r-1} \sum_{k>j}^{2r} l_j l_k y_{i_j} y_{i_k} \geq -r, \quad r=1, \dots, r_2, \quad \forall \left\{ \begin{array}{l} 1 \leq i_1 < \dots < i_{2r} \leq n, \\ l \in \{-1, 1\}^{2r}. \end{array} \right. \quad (4.39)$$

где $2r_2 \leq n$. Здесь квадратичные неравенства (4.38) – это квадратичные неравенства вида (4.30) для всех возможных нечетных подмножеств бинарных переменных от троек (соответствует $r = 1$) до $2r_1 + 1$. Их количество $M(r_1) = \sum_{r=1}^{r_1} 4^r C_n^{2r+1}$. Квадратичные неравенства (4.39) – это квадратичные неравенства вида (4.31) для всех возможных четных подмножеств бинарных переменных от двоек ($r = 1$) до $2r_2$. Их количество $M(r_2) = \sum_{r=1}^{r_2} 4^r C_n^{2r}$.

Множество решений системы (4.37)–(4.39) не изменится, если в неравенствах (4.38) и (4.39) квадратичные термы $y_{i_j} y_{i_k}$ заменить на линейные $x_{i_j i_k}$

для всех $1 \leq j < k \leq n$. В результате получаем систему (4.35)–(4.37), эквивалентную системе (4.37)–(4.39). Релаксация (ослабление) бинарных переменных $y \in \{-1, 1\}^n$ и $x \in \{-1, 1\}^{\frac{n(n-1)}{2}}$ для системы (4.35)–(4.37) порождает многогранник, определяемый следующими линейными неравенствами

$$-1 \leq y_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad -1 \leq x_{ij} \leq 1, \quad \forall (i, j) : 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.40)$$

$$(y, x) \in LBiQP_n(r_1, r_2). \quad (4.41)$$

В силу своего построения многогранник (4.40),(4.41) аппроксимирует сверху бинарный квадратичный многогранник $BiQP_n$. Однако, неравенства (4.40) и (4.41) являются избыточными (несущественными). Действительно, в многограннике $LBiQP_n(r_1, r_2)$, как обязательные, включены линейные неравенства для всех возможных пар двоек переменных y_i и y_j . Они следуют из квадратичных неравенств (4.32) и имеют такую форму:

$$\begin{cases} +y_i + y_j + x_{ij} \geq -1, \\ -y_i - y_j + x_{ij} \geq -1, \\ -y_i + y_j - x_{ij} \geq -1, \\ +y_i - y_j - x_{ij} \geq -1, \end{cases} \quad \forall (i, j) : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.42)$$

Легко видеть, что из неравенств (4.42) следуют линейные неравенства (4.40). Так, для произвольной пары (i, j) , сложив первое и второе неравенства из (4.42), имеем: $2x_{ij} \geq -2$ или $x_{ij} \geq -1$, а сложив третье и четвертое неравенства из (4.42) имеем: $-2x_{ij} \geq -2$ или $x_{ij} \leq 1$. По аналогичной схеме следуют и двусторонние границы на переменные $y_i, i = 1, \dots, n$. Так, сложив первое и четвертое неравенство из (4.42), получаем неравенство $y_i \geq -1$, а сложив второе и третье неравенства, получаем $y_i \leq 1$. Учитывая то, что индекс i принимает все значения $1, \dots, n-1$, получаем ограничения на все компоненты переменной y , за исключением последней. Границы на последнюю компоненту получаем путем сложения первого и третьего неравенств ($y_j \geq -1$) и второго и четвертого неравенств ($y_j \leq 1$), а индекс переменной y_j может принимать значение равное n .

Итак имеем, что многогранник (4.40),(4.41) тождественен многограннику $LBiQP_n(r_1, r_2)$ и, следовательно, последний аппроксимирует сверху бинарный квадратичный многогранник $BiQP_n$. Многогранник $LBiQP_n(r_1, r_2)$

включает все неравенства для нечетных подмножеств $M(r_1)$ и все неравенства для четных подмножеств $M(r_2)$. Отсюда получаем полное количество неравенств

$$M(r_1, r_2) = M(r_1) + M(r_2) = \sum_{r=1}^{r_1} 4^r C_n^{2r+1} + \sum_{r=1}^{r_2} 4^r C_n^{2r}.$$

В заключение подсчитаем максимально возможное количество линейных неравенств в многограннике $LBiQP_n(r_1, r_2)$. Для этого воспользуемся двумя равенствами:

$$(1+2)^n = 1 + 2n + \sum_{i=2}^n 2^i C_n^i = 1 + 2n + \sum_{r=1}^{2r \leq n} 2^{2r} C_n^{2r} + \sum_{r=1}^{2r+1 \leq n} 2^{2r+1} C_n^{2r+1}$$

и

$$(1-2)^n = 1 - 2n + \sum_{i=2}^n (-2)^i C_n^i = 1 - 2n + \sum_{r=1}^{2r \leq n} 2^{2r} C_n^{2r} - \sum_{r=1}^{2r+1 \leq n} 2^{2r+1} C_n^{2r+1},$$

которые следуют из бинома Ньютона. Если обозначить $\sum_{r=1}^{2r \leq n} 2^{2r} C_n^{2r}$ как S_{2r} , а $\sum_{r=1}^{2r+1 \leq n} 2^{2r+1} C_n^{2r+1}$ как S_{2r+1} , то получаем систему из двух линейных уравнений

$$3^n = 1 + 2n + S_{2r} + S_{2r+1}$$

и

$$(-1)^n = 1 - 2n + S_{2r} - S_{2r+1},$$

из которой находим $S_{2r} = \frac{3^n + (-1)^n}{2} - 1$ и $S_{2r+1} = \frac{3^n - (-1)^n}{2} - 2n$. Полное количество линейных неравенств в многограннике $LBiQP_n$ равно

$$M(n) = \sum_{r=1}^{2r+1 \leq n} 2^{2r} C_n^{2r+1} + \sum_{r=1}^{2r \leq n} 2^{2r} C_n^{2r} = \frac{1}{2} S_{2r+1} + S_{2r} = \frac{3^{n+1} + (-1)^n}{4} - (n+1).$$

Из последнего следует, что при четном n число неравенств равно $\frac{3(3^n-1)}{4} - n$ (реализуется при $r_1 = \frac{n}{2} - 1$ и $r_2 = \frac{n}{2}$), а при нечетном n число неравенств равно $\frac{3^{n+1}-5}{4} - n$ (реализуется при $r_1 = r_2 = \frac{n-1}{2}$). \square .

При $n = 2, 3, 4$ многогранники $LBiQP_n$ полностью совпали с описывающими многогранники $BiQP_n$ неприводимыми системами линейных неравенств,

которые получены с помощью программы Skeleton. Многогранник $BiQP_2$ описывается 4 линейными неравенствами для пары бинарных переменных. Система неравенств для многогранника $BiQP_3$ включает 16 неравенств: из них 4 для тройки и 3 по 4 для трех возможных пар. В описании многогранника $BiQP_4$ используется 56 неравенств (из них 16 для четверки, 4 по 4 для четырех троек и 6 по 4 для шести пар переменных).

4.3 Новые двойственные оценки для числа устойчивости графа

Исследуются верхние лагранжевые двойственные оценки для числа устойчивости графа. Они базируются на использовании специального вида функционально избыточных квадратичных ограничений. Доказано, что две из построенных оценок есть не менее точными, чем самая точная из предложенных Н.З.Шором верхних оценок.

Пусть $G(V, E)$ – неориентированный граф, $V = \{1, \dots, n\}$ – множество его вершин и E – множество ребер. Подмножество вершин $S \subseteq V$ называется устойчивым множеством вершин графа G , если подграф из G , порожденный (индуцированный) подмножеством S , не содержит ни одного ребра из E . Число устойчивости графа G определяется как $\alpha(G) = \max\{|S| : S \subseteq V\}$, где S – устойчивое множество.

Нахождение числа устойчивости $\alpha(G)$ является NP -трудной задачей [11, 175]. В силу этого актуальными являются вопросы нахождения эффективных по точности верхних оценок для $\alpha(G)$. Н.З. Шор предложил три лагранжевых двойственных оценки $\Psi_1^*(G)$, $\Psi_2^*(G)$ и $\Psi_3^*(G)$. Все они являются оценками сверху для $\alpha(G)$ и каждая последующая оценка улучшает предыдущую за счет использования определенных семейств функционально избыточных ограничений. Способ построения этих оценок подробно описан в подразделе 1.3 для взвешенного числа устойчивости.

Ниже будут рассмотрены три новые верхние оценки для $\alpha(G)$ и доказано, что две из них являются не менее точными верхними оценками, чем оценка $\Psi_3^*(G)$. Она является наилучшей лагранжевой двойственной оценкой для

квадратичной задачи в следующей формулировке:

$$\alpha(G) = \max \sum_{i=1}^n x_i \quad (4.43)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0, \quad \forall (i, j) \in E, \quad (4.44)$$

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.45)$$

$$x_i x_j \geq 0, \quad \forall (i, j) \notin E, \quad (4.46)$$

$$x_i x_k + x_j x_k \leq x_k, \quad \forall (i, j) \in E, k \neq i, j. \quad (4.47)$$

Здесь булева переменная x_i равна единице, если вершина i включается в устойчивое множество, и равна нулю, в противном случае.

Оценка $\Psi_1^*(G)$ соответствует задаче (4.43)–(4.45) и равна числу Ловаса, т.е. $\Psi_1^*(G) = \theta(G)$. Оценка $\Psi_2^*(G)$ соответствует задаче (4.43)–(4.46) и равна улучшенному числу Ловаса, т.е. $\Psi_2^*(G) = \theta'(G)$.

Построение новых верхних оценок. Новые лагранжевы двойственные оценки для $\alpha(G)$ построим подобно тому, как построены оценки Н.З. Шора. За базовую возьмем простейшую квадратичную задачу и будем последовательно добавлять в нее семейства функционально избыточных ограничений для бинарных переменных. Поэтому нашей базовой квадратичной задачей будет не простейшая задача (4.43)–(4.45), сформулированная в булевых переменных, а ее аналог, сформулированный в бинарных переменных y_i , где

$$y_i = 1 - 2x_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.48)$$

Здесь соответствующая вершине i бинарная переменная y_i равна -1 , если вершина i включается в устойчивое множество, и равна 1 в противном случае.

Опишем последовательность действий (шагов) для построения той формулировки квадратичной экстремальной задачи, которая соответствует новым верхним оценкам.

Шаг 1. С помощью замены переменных (4.48) переформулируем задачу (4.43)–(4.45). В результате для максимального устойчивого множества полу-

чим квадратичную задачу в следующей формулировке:

$$\alpha(G) = \max \left(\frac{n}{2} - \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{2} \right) \quad (4.49)$$

при ограничениях

$$y_i y_j - y_i - y_j + 1 = 0, \quad \forall (i, j) \in E, \quad (4.50)$$

$$y_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.51)$$

Шаг 2. Введем новые переменные, добавив к задаче (4.49)–(4.51) следующие квадратичные ограничения

$$\begin{cases} y_i y_j - y_{ij} = 0, \\ y_{ij}^2 - 1 = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.52)$$

Шаг 3. Для учета связей для всех возможных двоек переменных добавим семейство функционально избыточных квадратичных ограничений

$$\begin{cases} y_{ij} y_i - y_j = 0, \\ y_{ij} y_j - y_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n. \quad (4.53)$$

Они следуют из того, что для произвольной двойки бинарных переменных y_i, y_j справедливы равенства $y_i = (y_i y_j) y_j = y_{ij} y_j$, $y_j = (y_i y_j) y_i = y_{ij} y_i$.

Шаг 4. Для учета связей для всех возможных троек переменных добавим семейство функционально избыточных квадратичных ограничений

$$\begin{cases} y_{ij} y_k - y_{ik} y_j = 0, \\ y_{ij} y_k - y_{jk} y_i = 0, \\ y_{ik} y_j - y_{ij} = 0, \\ y_{ij} y_j - y_{ik} = 0, \\ y_{ij} y_{jk} - y_{ik} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \quad (4.54)$$

Ограничения (4.54) включают по два равенства (4.13) и по три равенства (4.12), справедливых для каждой тройки бинарных переменных y_i, y_j и y_k .

Шаг 5. Для учета дополнительных связей для всех возможных четверок переменных добавим семейство функционально избыточных ограничений

$$\begin{cases} y_{ij} y_{kl} - y_{ik} y_{jl} = 0, \\ y_{ij} y_{kl} - y_{il} y_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l : 1 \leq i < j < k < l \leq n. \quad (4.55)$$

Ограничения (4.55) включают по два линейно независимых равенства (4.17).

Итак, для максимального устойчивого множества имеем новую квадратичную задачу (4.49)–(4.55) в бинарных переменных. Она получена дополнением простейшей квадратичной задачи полным семейством функционально избыточных ограничений, которые сформированы в три группы. Первая группа – это ограничения (4.53). Таких ограничений $n(n-1)$, и они описывают связи внутри каждой двойки переменных. Вторая группа – это ограничения (4.54). Таких ограничений $5n(n-1)(n-2)/6$, и они описывают дополнительные связи для переменных внутри каждой тройки переменных. Третья группа ограничений это ограничения (4.55). Таких ограничений $n(n-1)(n-2)(n-3)/12$, и они описывают дополнительные связи для переменных внутри каждой четверки переменных.

Оценки $\psi_b^*(G)$ и $\psi_c^*(G)$ и их свойства. Если от бинарных переменных перейти к булевым переменным (по правилу $y_i = 1 - 2x_i$ и $y_{ij} = 1 - 2x_{ij}$), то тогда квадратичной задаче (4.49)–(4.55) будет соответствовать следующая квадратичная задача в булевых переменных:

$$\alpha(G) = \max \sum_{i=1}^n x_i \quad (4.56)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0, \quad \forall (i, j) \in E, \quad (4.57)$$

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.58)$$

$$\begin{cases} 2x_i x_j - x_i - x_j + x_{ij} = 0, \\ x_{ij} - x_{ji} = 0, \quad \forall i, j \\ x_{ij}^2 - x_{ij} = 0, \end{cases} \quad (4.59)$$

$$\begin{cases} 2x_i x_{ij} - x_i + x_j - x_{ij} = 0, \\ 2x_j x_{ij} + x_i - x_j - x_{ij} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j \quad (4.60)$$

$$\begin{cases} 2x_k x_{ij} - 2x_j x_{ik} + x_j - x_k - x_{ij} + x_{ik} = 0, \\ 2x_k x_{ij} - 2x_i x_{jk} + x_i - x_k - x_{ij} + x_{jk} = 0, \\ 2x_{ik} x_{jk} + x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} = 0, \quad \forall i, j, k \\ 2x_{ij} x_{jk} - x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} = 0, \\ 2x_{ij} x_{ik} - x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} = 0, \end{cases} \quad (4.61)$$

$$\begin{cases} 2x_{ij} x_{kl} - 2x_{ik} x_{jl} - x_{ij} + x_{ik} + x_{jl} - x_{kl} = 0, \\ 2x_{ij} x_{kl} - 2x_{il} x_{jk} - x_{ij} + x_{il} + x_{jk} - x_{kl} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l \quad (4.62)$$

Оценка $\psi_b^*(G)$ – наилучшая лагранжева двойственная оценка для задачи (4.56)–(4.61), а оценка $\psi_c^*(G)$ – наилучшая лагранжева двойственная оценка для задачи (4.56)–(4.62). Наилучшую лагранжеву двойственную оценку для задачи (4.56)–(4.60) условимся обозначать $\psi_a^*(G)$. Она будет не хуже, чем оценка $\Psi_2^*(G)$ (покажем ниже по ходу доказательства свойств более сильных оценок). Последнее означает, что есть примеры задач (см. [198]), где эта оценка будет более точной, чем оценка для простейшей квадратичной задачи.

Формулировка задачи (4.56)–(4.62) отличается от формулировки (4.49)–(4.55) тем, что в ней отсутствует упорядоченность индексов тех переменных, которые входят в соответствующие группы ограничений. Для этого в группу ограничений (4.57), которые связаны с новыми переменными, добавлено ограничение $x_{ij} = x_{ji}$. Оно не изменяет содержательный смысл задачи (4.49)–(4.55), а лишь только делает ее формулировку в терминах булевых переменных более удобной для доказательства свойств оценок (хотя заметим, что многие функционально избыточные ограничения при этом дублируются). Чтобы формулировка задачи (4.56)–(4.62) была более краткой в ней опущена и запись того, что в ограничениях, которые справедливы для многих индексов, среди этих индексов нет двух совпадающих. Это будем считать само собой разумеющимся.

Для оценок $\psi_b^*(G)$ и $\psi_c^*(G)$ справедлива следующая теорема.

Теорема 4.4 *Для произвольного графа G имеет место неравенство*

$$\Psi_3^*(G) \geq \psi_b^*(G) \geq \psi_c^*(G),$$

и, следовательно, оценка $\psi_b^(G)$ (а тем более оценка $\psi_c^*(G)$) является не менее точной верхней оценкой для $\alpha(G)$, чем оценка $\Psi_3^*(G)$.*

Доказательство. Тот факт, что $\psi_b^*(G) \geq \psi_c^*(G)$ следует из способа построения задач квадратичного типа для этих оценок. Так, оценка $\psi_c^*(G)$ соответствует задаче (4.56)–(4.62), которая содержит в себе задачу (4.56)–(4.61), которой соответствует оценка $\psi_b^*(G)$.

Для доказательства того, что $\psi_3^*(G) \geq \psi_b^*(G)$ покажем, что из ограничений задачи (4.56)–(4.61) можно получить задачу квадратичного типа (4.43)–

(4.47), которой соответствует оценка $\psi_3^*(G)$. Учитывая что, задача (4.56)–(4.58) совпадает с задачей (4.43)–(4.45), достаточно показать, что из ограничений задачи (4.56)–(4.61) следуют функционально избыточные ограничения (4.46) и (4.47).

Вначале покажем, как из ограничений (4.57)–(4.60) получаются функционально избыточные ограничения (4.46). Заметим, что для произвольной пары (i, j) справедливо неравенство

$$x_i + x_j - x_{ij} \geq 0. \quad (4.63)$$

На самом деле, из ограничений (4.59) и (4.60) следуют три равенства

$$\begin{cases} 2x_i x_j - x_i - x_j + x_{ij} = 0, \\ 2x_i x_{ij} - x_i + x_j - x_{ij} = 0, \\ 2x_j x_{ij} + x_i - x_j - x_{ij} = 0, \end{cases} \quad (4.64)$$

которые будут справедливы для произвольной пары (i, j) . Если из первого равенства из (4.64) вычесть второе и третье равенства, то получим равенство

$$2x_i x_j - 2x_i x_{ij} - 2x_j x_{ij} - x_i - x_j + 3x_{ij} = 0,$$

которое, учитывая что $x_{ij}^2 = x_{ij}$, перепишем как

$$x_{ij}^2 + 2x_i x_j - 2x_i x_{ij} - 2x_j x_{ij} - x_i - x_j + 2x_{ij} = 0.$$

Если прибавить к нему еще два равенства $x_i^2 - x_i = 0$ и $x_j^2 - x_j = 0$ из (4.58), получаем равенство

$$x_i^2 + x_j^2 + x_{ij}^2 + 2x_i x_j - 2x_i x_{ij} - 2x_j x_{ij} - 2x_i - 2x_j + 2x_{ij} = 0,$$

которое можно переписать в следующей форме:

$$(x_i + x_j - x_{ij})^2 - 2(x_i + x_j - x_{ij}) = 0.$$

Из последнего имеем

$$x_i + x_j - x_{ij} = 0, \quad \text{либо} \quad x_i + x_j - x_{ij} = 2,$$

откуда следует неравенство (4.63), так как

$$x_i + x_j - x_{ij} \geq \min\{0, 2\} \geq 0.$$

Пусть $(i, j) \notin E$. Тогда из первого уравнения из (4.64) имеем

$$2x_i x_j = x_i + x_j - x_{ij}, \quad (i, j) \notin E,$$

откуда, учитывая неравенство (4.63), получаем справедливость и неравенства

$$x_i x_j \geq 0, \quad (i, j) \notin E,$$

что завершает доказательство для функционально избыточных ограничений (4.46). Заметим, что это дает доказательство того, что $\psi_a^*(G) \leq \psi_2^*(G)$, так как мы получили ограничения для оценки $\Psi_2^*(G)$ из задачи (4.57)–(4.59), которой соответствует оценка $\psi_a^*(G)$.

Далее покажем, как из ограничений (4.57)–(4.60) следуют функционально избыточные ограничения (4.47). Пусть $(i, j) \in E$ и $k \neq i, j$. Из ограничений (4.59) следует, что для пары (i, k) имеет место равенство

$$2x_i x_k - x_i - x_k + x_{ik} = 0,$$

а для пары (j, k) – равенство

$$2x_j x_k - x_j - x_k + x_{jk} = 0.$$

Для пары $(i, j) \in E$ из ограничений (4.59), учитывая что согласно (4.58) $x_i x_j = 0$, имеем равенство

$$-x_i - x_j + x_{ij} = 0.$$

Сложив два первых равенства и вычтя из результата третье равенство, получим равенство

$$2x_i x_k + 2x_j x_k - 2x_k - x_{ij} + x_{ik} + x_{jk} = 0,$$

которое перепишем в следующем виде

$$x_i x_k + x_j x_k = x_k + \frac{1}{2}(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}). \quad (4.65)$$

Для оценки правой части в (4.65) воспользуемся следующей цепочкой рассуждений. Из ограничений (4.61) имеем три равенства

$$\begin{cases} 2x_{ik}x_{jk} + x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} = 0, \\ 2x_{ij}x_{jk} - x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} = 0, \\ 2x_{ij}x_{ik} - x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} = 0, \end{cases}$$

которые связывают между собой переменные x_{ij} , x_{ik} и x_{jk} . Вычтем из первого равенства второе и третье. В результате получим

$$-2x_{ij}x_{ik} - 2x_{ij}x_{jk} + 2x_{ik}x_{jk} + 3x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} = 0,$$

которое с учетом того, что $x_{ij}^2 = x_{ij}$, $x_{ik}^2 = x_{ik}$ и $x_{jk}^2 = x_{jk}$ из ограничений (4.59), можно переписать следующим образом

$$x_{ij}^2 + x_{ik}^2 + x_{jk}^2 - 2x_{ij}x_{jk} - 2x_{ij}x_{ik} + 2x_{ij}x_{jk} + 2(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}) = 0.$$

Последнее равенство можно записать как

$$(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk})^2 + 2(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}) = 0,$$

$$((x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}) + 2)(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}) = 0,$$

откуда имеем

$$x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} \leq \max\{-2, 0\} = 0.$$

Учитывая последнее неравенство, из (4.65) получаем

$$x_i x_k + x_j x_k = x_k + \frac{1}{2}(x_{ij} - x_{ik} - x_{jk}) \leq x_k,$$

что справедливо для произвольной пары $(i, j) \in E$ и произвольного $k \neq i, j$. Это завершает доказательство для функционально избыточных ограничений (4.47). Теорема доказана. \square

Из теоремы 4.4 следует, что если граф G является t -совершенным, либо h -совершенным, то имеем $\psi_b^*(G) = \psi_c^*(G) = \alpha(G)$, и, следовательно, обе оценки являются точными верхними оценками для $\alpha(G)$ в t -совершенных и h -совершенных графах. То что, для таких графов $\Psi_3^*(G) = \alpha(G)$, доказано Н.З. Шором. Более сильный результат о точности построенных оценок следует из свойств оценки Шора, которые рассмотрены в подразделе 5.1.

Вычислительные эксперименты показали, что свойства новых оценок сильнее, чем сформулированные в теореме 4.4. Так, например, первая оценка $\psi_b^*(G)$ уточняет число Ловаса $\theta'(G)$ как для графа в форме икосаэдра I_{12} (включает 12 вершин и 30 ребер), так и для дополнительного к нему графа

\bar{I}_{12} (включает 12 вершин и 36 ребер). Для обоих графов эта оценка одинакова $\psi_b^*(\bar{I}_{12}) = \psi_b^*(I_{12}) \approx 3.185116$. Оказывается, что оценка $\psi_c^*(G)$ является точной для обоих графов, т.е.

$$\psi_c^*(\bar{I}_{12}) = \alpha(\bar{I}_{12}) = 3, \quad \psi_c^*(I_{12}) = \alpha(I_{12}) = 3.$$

В заключение отметим, что в ряде случаев оценки $\psi_b^*(G)$ и $\psi_c^*(G)$ являются более точными, чем оценки, полученные с помощью „copositive programming“ [160], одной из наилучших техник для нахождения подобных оценок. Так, например, оценка полученная в работе [181] для графа \bar{I}_{12} равна улучшенному числу Ловаса $(1 + \sqrt{5}) \approx 3.236068$ и является хуже, чем оценка $\psi_b^*(\bar{I}_{12})$.

4.4 Задача о максимальном взвешенном разрезе графа

Рассматриваются три новые квадратичные модели для задачи о максимальном взвешенном разрезе графа (MaxCut-задача). Они получены с помощью двух способов построения функционально избыточных квадратичных ограничений. Исследуется связь соответствующих им лагранжевых двойственных оценок с известной верхней оценкой Барахоны-Маджуба (1986) и рассматриваются уточненные ее аналоги.

Постановка задачи Пусть $G = (V, E)$ – взвешенный неориентированный граф с множеством вершин $V = \{1, \dots, n\}$ и множеством ребер E . Вес ребра $(i, j) \in E$ задан произвольным вещественным числом w_{ij} , и с учетом неориентированности графа ребра (i, j) и (j, i) отождествляются, т.е. $w_{ij} = w_{ji}$. Без ограничения общности будем считать, что граф G полный, так как ребрам дополнительного графа \bar{G} можно присвоить нулевой вес. Во избежание недоразумений, в тех случаях, когда понадобится неполный граф G , будем это указывать.

Задача о максимальном взвешенном разрезе графа (MaxCut-задача) состоит в следующем. Пусть V_1 и V_2 – непустые и непересекающиеся подмножества вершин графа G , такие, что $V_1 \cup V_2 = V$. Разрез графа G ($Cut(G)$) – это совокупность тех ребер, концевые вершины которых лежат в разных

подмножествах. Вес разреза $Cut(G)$ определяется как сумма весов его ребер. MaxCut-задача заключается в разбиении множества вершин V на два таких подмножества V_1^* и V_2^* , чтобы соответствующий этому разбиению вес разреза $Cut(G)$ был максимальным. Максимальный вес разреза $Cut(G)$ обозначим $mc(G, w)$.

В общем случае MaxCut-задача является NP-трудной ([11], с. 113). В силу этого представляют интерес вопросы, связанные с уточнением верхних оценок для $mc(G, w)$. Ниже рассматриваются два типа верхних оценок для $mc(G, w)$: оценки, получаемые усовершенствованием квадратичных моделей, и оценки, получаемые с помощью линейных моделей, которым соответствуют задачи линейного программирования.

Простейшая квадратичная модель. Пусть вершине $i \in V, i \in \{1, \dots, n\}$ соответствует бинарная переменная $x_i \in \{-1, 1\}$ такая, что

$$x_i = \begin{cases} -1, & \text{если } i \in V_1, \\ +1, & \text{если } i \in V_2. \end{cases}$$

Пусть $w_{ij} = w_{ji} = 0$, если $(i, j) \notin E$.

Простейшая квадратичная модель для MaxCut-задачи приведена в [198, 138]. Она формулируется с помощью квадратичной экстремальной задачи

$$mc(G, w) = \max \left\{ f(x) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j): i < j} w_{ij} (1 - x_i x_j) \right\} \quad (4.66)$$

при ограничениях

$$x_i^2 = 1 \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (4.67)$$

Модель (4.66), (4.67) назовем A-моделью. A-модель является многоэкстремальной задачей нелинейного программирования, в которой целевая функция (4.66) и ограничения (4.67) – квадратичные однородные функции, т.е. не содержат линейных членов от переменных $x_i, i = 1, \dots, n$.

Пусть $\psi_A^*(G, w)$ – наилучшая лагранжева двойственная оценка, соответствующая A-модели. При произвольных значениях весов ребер графа G оценку $\psi_A^*(G, w)$ можно найти за полиномиальное время с любой наперед заданной точностью. Однородность квадратичных функций (4.66) и (4.67) в A-

модели позволяет вычислить $\psi_A^*(G, w)$ проще [138, 168, 2], чем для общего случая квадратичной оптимизационной задачи. Благодаря этому Н.З. Шор и О.А. Березовский в работе 1995 года [138] нахождение оценки $\psi_A^*(G, w)$ свели к негладкой задаче безусловной оптимизации.

Оценка $\psi_A^*(G, w)$ является верхней оценкой для оптимального веса разреза $Cut(G)$, т.е. обладает следующим свойством: $\psi_A^*(G, w) \geq mc(G, w)$. Однако оценка $\psi_A^*(G, w)$ в большинстве случаев является сильно завышенной. Так, например, для графа K_3 (3-клика) с весами ребер, равными единице, $\psi_A^*(K_3) = 9/4 = 2,25$. Оптимальное значение разреза для этого же графа – $mc(K_3) = 2$. Таким образом, относительная точность оценки $\psi_A^*(K_3)$ определяется величиной

$$\frac{\psi_A^*(K_3) - mc(K_3)}{mc(K_3)} = (2.25 - 2)/2 = 0.25/2 = 1/8$$

и составляет 12,5%.

В связи с этим возникает вопрос: можно ли улучшить точность лагранжевых оценок для MaxCut-задачи по сравнению с оценкой $\psi_A^*(G, w)$? Ниже приведем три квадратичные модели, которым будут соответствовать более точные верхние оценки, чем оценка Шора–Березовского (1995). При построении моделей использованы функционально избыточные квадратичные ограничения для бинарных переменных из подраздела 4.1.

Новая квадратичная модель. Пусть $y_{ij} = x_i x_j$ – новые переменные для всех i и j , таких, что $1 \leq i < j \leq n$. Количество новых переменных y равно $\frac{n(n-1)}{2}$. Новую модель для MaxCut-задачи сформулируем с помощью квадратичной задачи

$$mc(G, w) = \max \left\{ f(x) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j): i < j} w_{ij} (1 - x_i x_j) \right\} \quad (4.68)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.69)$$

$$y_{ij} = x_i x_j \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.70)$$

$$y_{ij}^2 = 1 \quad \forall i, j : 1 \leq i < j \leq n, \quad (4.71)$$

$$\begin{aligned}
y_{ik}y_{jk} - y_{ij} &= 0, \\
y_{ij}y_{jk} - y_{ik} &= 0, \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \\
y_{ij}y_{ik} - y_{jk} &= 0,
\end{aligned} \tag{4.72}$$

Модель (4.68)–(4.72) назовем В-моделью. Она является „расширенным“ (за счет добавления новых переменных и новых ограничений) аналогом А-модели. Здесь (4.68) и (4.69) в точности совпадают с (4.66) и (4.67). Новые ограничения имеют следующий смысл. Ограничения (4.70) связаны с введением новых переменных y , ограничения (4.71) соответствуют „бинарности“ переменных y и следуют из правила их введения, так как в силу (4.67) для любых i, j , таких, что $1 \leq i < j \leq n$, всегда справедливо равенство $y_{ij}^2 = (x_i x_j)^2 = x_i^2 x_j^2 = 1$. Ограничения (4.72) задают три функционально избыточные квадратичные ограничения, которые для троек бинарных переменных следуют из (4.12).

Пусть $\psi_B^*(G, w)$ – наилучшая лагранжева двойственная оценка, соответствующая В-модели. Она является верхней оценкой для $mc(G, w)$ и, кроме того, $\psi_B^*(G, w) \leq \psi_A^*(G, w)$. Во многих случаях $\psi_B^*(G, w)$ оказывается более точной верхней оценкой для $mc(G, w)$, чем $\psi_A^*(G, w)$. Подтверждением служит пример MaxCut-задачи для графа K_3 с единичными весами ребер. В этом случае $\psi_B^*(K_3) = 2$ и есть точной верхней оценкой для $mc(K_3)$. Заметим, что относительная точность для оценки $\psi_A^*(K_3)$ составляла 12,5%.

Наличие в В-модели функционально избыточных квадратичных ограничений (4.72) способствует улучшению верхних оценок для $mc(G, w)$. Этому факту есть два объяснения.

Первое, чисто техническое, состоит в следующем. Если из В-модели убрать ограничения (4.72), то оптимальная лагранжева оценка совпадает с $\psi_A^*(G, w)$, и никакого улучшения верхней оценки для $mc(G, w)$ получить не удастся. Функционально избыточные квадратичные ограничения (4.72) описывают определенного рода квадратичные зависимости между всевозможными тройками переменных x_i , x_j и x_k , т.е. эти зависимости будут отражены в функции Лагранжа, соответствующей В-модели. Следовательно, оценка $\psi_B^*(G, w)$ может оказаться лучше, чем оценка $\psi_A^*(G, w)$, которая соответствует А-модели, где подобные зависимости для троек переменных x_i , x_j и x_k отсутствуют.

Второе объяснение использует содержательный смысл функционально избыточных квадратичных ограничений. Новая переменная $y_{ij} = x_i x_j$ означает не что иное, как бинарную „реберную“ переменную

$$y_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{если ребро } (i, j) \in \text{Cut}(G), \\ +1, & \text{если ребро } (i, j) \notin \text{Cut}(G). \end{cases} \quad (4.73)$$

Такое свойство переменной y_{ij} следует из содержательного смысла „вершинных“ переменных x_i и x_j . На самом деле, если ребро (i, j) принадлежит разрезу $\text{Cut}(G)$, то вершины i и j принадлежат разным подмножествам, $i \in V_2$ и $j \in V_1$ либо $i \in V_1$ и $j \in V_2$. Это означает, что пара „вершинных“ переменных x_i и x_j может принимать два возможных „бинарных“ исхода: $(x_i, x_j) = (1, -1)$ либо $(x_i, x_j) = (-1, 1)$, откуда в обоих случаях $y_{ij} = x_i x_j = -1$. Если ребро (i, j) не принадлежит разрезу $\text{Cut}(G)$, то обе вершины i и j принадлежат одному и тому же подмножеству, т.е. $i, j \in V_2$ либо $i, j \in V_1$. Это означает, что та же пара „вершинных“ переменных будет либо $(x_i, x_j) = (1, 1)$, либо $(x_i, x_j) = (-1, -1)$, откуда в обоих случаях $y_{ij} = x_i x_j = 1$.

Пусть в графе G выделен подграф $K_3(i, j, k)$ (3-клика), построенный для фиксированных вершин i, j, k , и пусть y_{ij}, y_{ik}, y_{jk} – „реберные“ переменные, соответствующие трем его ребрам – (i, j) , (i, k) и (j, k) . Тройка „реберных“ переменных (y_{ij}, y_{ik}, y_{jk}) для $K_3(i, j, k)$ может принимать всего четыре различных „бинарных“ значения, а именно,

$$(y_{ij}, y_{ik}, y_{jk}) = \begin{pmatrix} +1, +1, +1 \\ +1, -1, -1 \\ -1, +1, -1 \\ -1, -1, +1 \end{pmatrix}.$$

Первое значение означает, что ни одно из ребер $K_3(i, j, k)$ не попадает в разрез $\text{Cut}(G)$, или, иначе, все три вершины i, j и k принадлежат одному из подмножеств: V_1 либо V_2 . Оставшиеся три значения задают все возможные комбинации для пар ребер неориентированного подграфа $K_3(i, j, k)$ (их будет $C_3^2 = \frac{3 \cdot 2}{2} = 3$) и означают, что разрезу могут принадлежать только два, но произвольных ребра из трех. Другими словами, одна (но произвольная) вершина из подграфа $K_3(i, j, k)$ принадлежит одному подмножеству, а две

оставшиеся вершины – другому.

Легко убедиться, что все четыре приведенных „бинарных“ значения для тройки „реберных“ переменных (y_{ij}, y_{ik}, y_{jk}) удовлетворяют ограничениям (4.72) при соответствующих этой тройке индексах i, j и k . Следовательно, для MaxCut-задач функционально избыточные квадратичные ограничения (4.72) отражают простой факт: для всех возможных подграфов $K_3(i, j, k)$ из графа G разрез $Cut(G)$ либо могут принадлежать два (но произвольных) ребра подграфа $K_3(i, j, k)$, либо ни одно из ребер $K_3(i, j, k)$ не может принадлежать разрез $Cut(G)$. Других вариантов нет. Очевидно, что если в графе G существует хотя бы один подграф $K_3(i, j, k)$, для которого ребра в оптимальном разрезе определяются однозначно, то эта информация будет содержательной для В-модели и следует ожидать, что оценка $\psi_B^*(G, w) < \psi_A^*(G, w)$.

Итак, В-модель одновременно использует „вершинные“ и „реберные“ переменные и их взаимосвязь выражена через содержательный смысл функционально избыточных ограничений (4.72). И хотя оценка $\psi_B^*(G, w)$ является более точной, ее нахождение намного сложнее, чем нахождение оценки $\psi_A^*(G, w)$ для А-модели. Далее будет проведено „упрощение“ В-модели, с целью уменьшить количество переменных.

“Реберная” квадратичная модель и ее анализ. Упростить В-модель помогут следующие соображения.

Заметим, что целевая функция в В-модели осталась такой же, как и в А-модели. Однако, учитывая однородность функции $f(x)$, ее можно записать как линейную функцию, которая зависит только от „реберных“ переменных y , т.е.

$$f(x) = F(y) = \sum_{i,j:i < j} w_{ij} (1 - y_{ij}).$$

Если в В-модели целевой функцией вместо $f(x)$ сделать функцию $F(y)$, это не повлияет на значение оптимальной лагранжевой оценки: она все равно будет равна оценке $\psi_B^*(G, w)$. Однако в результате такой замены в В-модели связь между переменными x и y остается только в ограничениях (4.70), которые обусловлены введением новых (реберных) переменных y . Следовательно,

если из В-модели убрать ограничения (4.70), то можно опустить и ограничения (4.69) как несущественные. Действуя таким образом, можно из В-модели убрать переменные x и оставить только „реберные“ переменные y .

Итак, новую „реберную“ модель для MaxCut-задачи (С-модель) сформулируем с помощью квадратичной задачи

$$F^*(G, w) = \max \left\{ F(y) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j):i<j} w_{ij} (1 - y_{ij}) \right\} \quad (4.74)$$

при ограничениях:

$$\begin{aligned} y_{ik}y_{jk} - y_{ij} &= 0, \\ y_{ij}y_{jk} - y_{ik} &= 0, \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \\ y_{ij}y_{ik} - y_{jk} &= 0 \end{aligned} \quad (4.75)$$

$$y_{ij}^2 = 1 \quad \forall i, j : i < j. \quad (4.76)$$

Очевидно, что $F^*(G, w) \geq mc(G, w)$ из-за исключения переменных x из В-модели. Это означает, что $F^*(G, w)$ можно использовать в качестве верхней оценки для $mc(G, w)$. Пусть $\psi_C^*(G, w)$ – наилучшая лагранжева двойственная оценка, соответствующая С-модели. Оценка $\psi_C^*(G, w)$ – верхняя оценка для $F^*(G, w)$, а тем самым и для $mc(G, w)$, т.е. $\psi_C^*(G, w) \geq mc(G, w)$.

Рассмотрим качество оценки $\psi_C^*(G, w)$. Так, например, $\psi_C^*(K_3) = 2$ и она точно так же, как и оценка $\psi_B^*(K_3)$, является точной верхней оценкой для $mc(K_3)$. Это неудивительно, так как далее будет показано, что из С-модели можно получить линейную модель из [157], которая считается одним из сильных результатов для верхних оценок в MaxCut-задачах.

С помощью „бинарных“ реберных переменных линейная модель из [157] формулируется с помощью задачи линейного программирования ([184], с. 37):
найти

$$f_{BM}^*(G, w) = \max \left\{ \frac{1}{2} \sum_{(i,j):i<j} w_{ij} (1 - y_{ij}) \right\} \quad (4.77)$$

при ограничениях:

$$\begin{aligned} y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} &\geq -1, \\ y_{ij} - y_{ik} - y_{jk} &\geq -1, \\ -y_{ij} + y_{ik} - y_{jk} &\geq -1, \\ -y_{ij} - y_{ik} + y_{jk} &\geq -1 \end{aligned} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \quad (4.78)$$

Оценка $f_{BM}^*(G, w)$ равна оптимальному значению задачи линейного программирования (4.77), (4.78), и является оценкой сверху для $mc(G, w)$. В том случае, когда неполный граф G принадлежит семейству графов, не стягиваемых к K_5 (5-клика), $f_{BM}^*(G, w) = mc(G, w)$ и, следовательно, $f_{BM}^*(G, w)$ является точной верхней оценкой для $mc(G, w)$.

Заметим, что линейная модель в форме (4.77), (4.78) носит скорее теоретический характер, чем практический. Так, например, практически реализуемый вариант этой линейной модели формулируется в терминах булевых (0-1) „реберных“ переменных и для неполного графа G . Именно для такой модели в [175] на основе метода эллипсоидов построен полиномиальный алгоритм для специального случая MaxCut-задачи (слабо двудольный граф с положительными весами ребер).

Покажем, как из S -модели получается линейная модель (4.77), (4.78). Целевая функция в обеих моделях одна и та же. Следовательно, требуется только показать, что из ограничений (4.75) и (4.76) вытекают ограничения (4.78).

Для произвольной тройки индексов i, j, k , таких, что $1 \leq i < j < k \leq n$, из ограничений (4.75) легко получить соотношения:

$$2y_{ik}y_{jk} + 2y_{ij}y_{jk} + 2y_{ij}y_{ik} - 2(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) = 0, \quad (4.79)$$

$$2y_{ik}y_{jk} - 2y_{ij}y_{jk} - 2y_{ij}y_{ik} - 2(y_{ij} - y_{ik} - y_{jk}) = 0, \quad (4.80)$$

$$-2y_{ik}y_{jk} + 2y_{ij}y_{jk} - 2y_{ij}y_{ik} - 2(-y_{ij} + y_{ik} - y_{jk}) = 0, \quad (4.81)$$

$$-2y_{ik}y_{jk} - 2y_{ij}y_{jk} + 2y_{ij}y_{ik} - 2(-y_{ij} - y_{ik} + y_{jk}) = 0. \quad (4.82)$$

Эти равенства получены умножением на два четырех линейных комбинаций, построенных из трех ограничений из (4.75). Так (4.79) получено в результате сложения всех трех ограничений, (4.80) – вычитания из первого второго и третьего ограничений, (4.81) – вычитания из второго первого и третьего

ограничений, а (4.82) – результат вычитания из третьего второго и первого ограничений из (4.75).

Учитывая, что $y_{ij}^2 = 1$, $y_{ik}^2 = 1$, $y_{jk}^2 = 1$, равенство (4.79) можно записать как

$$y_{ij}^2 + y_{ik}^2 + y_{jk}^2 + 2y_{ik}y_{jk} + 2y_{ij}y_{jk} + 2y_{ij}y_{ik} - 2(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) - 3 = 0$$

или

$$\begin{aligned} (y_{ij} + y_{ik} + y_{jk})^2 - 2(y_{ij} + y_{ik} + y_{jk}) + 1 - 4 &= 0, \\ (y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} - 1)^2 &= 4. \end{aligned}$$

Из последнего равенства следует, что

$$y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} = 3 \quad \text{либо} \quad y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} = -1.$$

Таким образом, для суммы реберных переменных y_{ij} , y_{ik} и y_{jk} можно записать линейное неравенство

$$y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} \geq \min\{-1, +3\} = -1,$$

которое совпадает с первым из ограничений в (4.78).

Аналогичные рассуждения имеют место для равенств (4.80) – (4.82). В результате имеем равенства

$$\begin{aligned} (y_{ij} - y_{ik} - y_{jk} - 1)^2 &= 4, \\ (-y_{ij} + y_{ik} - y_{jk} - 1)^2 &= 4, \\ (-y_{ij} - y_{ik} + y_{jk} - 1)^2 &= 4, \end{aligned}$$

из которых так же, как и выше, следуют оставшиеся линейные ограничения из (4.78).

Итак, путем некоторого „огрубления“ С-модели получена линейная модель (4.77), (4.78). Это означает, что соответствующие новым В-модели и С-модели верхние оценки для MaxCut-задачи должны совмещать преимущества линейной модели из [157] и простейшей модели квадратичного типа (А-модели). Другими словами, для В-модели и С-модели верхние оценки являются не хуже, чем лучшая из двух оценок – Барахоны – Маджуба (1986) и

Шора–Березовского (1995). Так, например, для графа K_5 (5-клика) с единичными весами ребер А-модель дает более точную оценку ($\psi_A^*(K_5) = 25/4$), чем линейная модель ($f_{BM}^*(K_5) = 20/3$). Оценка $\psi_B^*(K_5) = 25/4$, оценка $\psi_C^*(K_5) = 25/4$, а следовательно, они совпадают с более точной оценкой $\psi_A^*(K_5)$. В то же время для графа C_5 (пятивершинный цикл) с единичными весами ребер ситуация обратная. Здесь линейная модель дает лучше оценку ($f_{BM}^*(C_5) = 4$), чем А-модель ($\psi_A^*(C_5) = \frac{5}{2} (1 + \cos \frac{\pi}{5}) \approx 4,522542$). Оценка $\psi_B^*(C_5) = 4$, оценка $\psi_C^*(C_5) = 4$, и следовательно, они также совпадают из более точной оценкой $f_{BM}^*(C_5)$.

Отметим, что линейную модель (4.77),(4.78) можно получить из квадратичной модели, использующей другой тип функционально избыточных квадратичных ограничений. Такая модель будет рассмотрена ниже.

„Вершинная“ квадратичная модель. Назовем ее D-моделью, которой соответствует квадратичная задача

$$mc(G, w) = \max \left\{ f(x) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j):i<j} w_{ij} (1 - x_i x_j) \right\} \quad (4.83)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 = 1 \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} x_i x_j + x_i x_k + x_j x_k &\geq -1, \\ -x_i x_j - x_i x_k + x_j x_k &\geq -1, \\ -x_i x_j + x_i x_k - x_j x_k &\geq -1, \\ x_i x_j - x_i x_k - x_j x_k &\geq -1, \end{aligned} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \quad (4.85)$$

D-модель получена дополнением А-модели квадратичными ограничениями для троек бинарных переменных (см. лемму 4.2) и сделано это для всех возможных троек вершинных переменных.

Пусть D-модели соответствует лагранжева двойственная оценка $\psi_D^*(G, w)$. Для $mc(G, w)$ она реализует верхнюю оценку, наиболее точную из двух оценок $\psi_A^*(G, w)$ и f_{BM}^* , как это имело место для моделей В и С.

Действительно, от D-модели легко перейти к линейной модели (4.77),(4.78). Для этого достаточно целевую функцию $f(x)$ в (4.83) заменить на $F(y)$, а функционально избыточные ограничения (4.85) – их аналогами в реберных

переменных $y_{ij} = x_i x_j$. В результате целевая функция из (4.83) перейдет в целевую функцию (4.77), а ограничения (4.85) примут вид

$$\begin{aligned} y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} &\geq -1, \\ -y_{ij} - y_{ik} + y_{jk} &\geq -1, \\ -y_{ij} + y_{ik} - y_{jk} &\geq -1, \\ y_{ij} - y_{ik} - y_{jk} &\geq -1 \end{aligned} \quad \forall i, j, k : 1 \leq i < j < k \leq n. \quad (4.86)$$

Легко видеть, что ограничения (4.86) с точностью до их порядка (второе и четвертое ограничения следует поменять местами) соответствуют ограничениям (4.78) из линейной модели. В результате этих замен ограничения (4.84) становятся несущественными и, убрав их, приходим к модели (4.77), (4.78).

Итак, из D-модели легко получается известная линейная модель из [157]. Однако имеется огромный резерв для расширения D-модели за счет функционально избыточных квадратичных ограничений для оставшихся нечетных подмножеств бинарных переменных, т.е. всех возможных пятерок, семерок вершинных переменных и т.д. Это приводит к тому, что лагранжевы двойственные оценки для расширенных D-моделей будут улучшать оценку $\psi_D^*(G, w)$.

Полное семейство функционально избыточных квадратичных ограничений для каждой „пятерки“ вершинных переменных x_i, x_j, x_k, x_l и x_m , где $1 \leq i < j < k < l < m \leq n$, состоит из $16 = 4^2$ квадратичных ограничений-неравенств:

$$\begin{aligned} (+x_i + x_j + x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (-x_i + x_j + x_k - x_l + x_m)^2 &\geq 1, \\ (-x_i + x_j + x_k + x_l - x_m)^2 &\geq 1, & (-x_i + x_j + x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, \\ (+x_i - x_j + x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i - x_j - x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, \\ (+x_i + x_j - x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i - x_j + x_k - x_l + x_m)^2 &\geq 1, \\ (+x_i + x_j + x_k - x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i - x_j + x_k + x_l - x_m)^2 &\geq 1, \\ (+x_i + x_j + x_k + x_l - x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i + x_j - x_k - x_l + x_m)^2 &\geq 1, \\ (-x_i - x_j + x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i + x_j - x_k + x_l - x_m)^2 &\geq 1, \\ (-x_i + x_j - x_k + x_l + x_m)^2 &\geq 1, & (+x_i + x_j + x_k - x_l - x_m)^2 &\geq 1. \end{aligned} \quad (4.87)$$

Если ограничения (4.87) прибавить к D-модели для всех возможных пятерок вершинных переменных, то получим расширенную D-модель, где полные семейства функционально избыточных квадратичных ограничений используются для таких нечетных подмножеств бинарных переменных, как всевоз-

возможные тройки и всевозможные пятерки реберных переменных. Расширенная D-модель содержит $4C_n^3 + 16C_n^5$ функционально избыточных квадратичных ограничений и ей соответствует более точная лагранжева двойственная оценка, чем оценка $\psi_D^*(G, w)$.

Расширенной D-модели соответствует расширенный аналог линейной модели из [157]. Он получается в результате прибавления к линейной модели (4.77), (4.78) линейных ограничений-неравенств, которые в расширенной D-модели соответствуют функционально избыточным ограничениям для пятерок, записанных с помощью реберных переменных. Таких линейных ограничений будет $16C_n^5$. Так, например, при заданных i, j, k, l, m , таких, что $1 \leq i < j < k < l < m \leq n$, первому ограничению из (4.87) соответствует линейное неравенство

$$y_{ij} + y_{ik} + y_{il} + y_{im} + y_{jk} + y_{jl} + y_{jm} + y_{kl} + y_{km} + y_{lm} \geq -2,$$

второму –

$$-y_{ij} - y_{ik} - y_{il} - y_{im} + y_{jk} + y_{jl} + y_{jm} + y_{kl} + y_{km} + y_{lm} \geq -2,$$

и т.д., а последнему –

$$y_{ij} + y_{ik} - y_{il} - y_{im} + y_{jk} - y_{jl} - y_{jm} - y_{kl} - y_{km} + y_{lm} \geq -2.$$

Расширенная линейная модель дает точную верхнюю оценку для $mc(G, w)$ тогда, когда неполный граф G принадлежит семейству графов, не стягиваемых к K_7 (7-клика).

Расширение D-модели можно продолжить, дополняя ее полным семейством функционально избыточных ограничений для всех возможных семерок реберных переменных. При этом прибавится $4^3 C_n^7 = 64C_n^7$ функционально избыточных квадратичных ограничений. Расширенной D-модели (за счет всех „пятерок“ и „семерок“) соответствует расширенный аналог линейной модели, который будет включать $64C_n^7$ линейных ограничений-неравенств, характеризующих все возможные семерки вершинных переменных. Такой линейной модели будет соответствовать точная верхняя оценка для $mc(G, w)$, если граф G принадлежит семейству графов, не стягиваемых к K_9 (9-клика).

Эту процедуру можно повторять и далее, формируя полные семейства для нечетного количества вершин до тех пор, пока не исчерпаем все нечетные числа до n . В итоге получаем квадратичную модель с огромным количеством функционально избыточных квадратичных ограничений. Этой модели соответствует линейная модель с точно таким же (к сожалению, неполиномиальным от размеров задачи) количеством ограничений. Тем не менее такая линейная модель дает точную верхнюю линейную оценку для $mc(G, w)$.

4.5 Основные результаты раздела 4

В разделе описана техника улучшения двойственных оценок в булевых и бинарных квадратичных экстремальных задачах и ее применение для задач о максимально независимом множестве вершин графа и максимальном взвешенном разрезе графа. Кратко основные научные результаты раздела можно сформулировать следующим образом.

1. Предложены три способа построения функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах с булевыми ($0 - 1$) и бинарными (± 1) переменными. Первые два способа генерируют квадратичные равенства, соответствующие введению новых переменных в форме произведения уже существующих переменных. Третий способ для бинарных переменных генерирует квадратичные неравенства, которые являются следствием того, что квадрат суммы нечетного количества ± 1 не меньше единицы. На их основе уточнены лагранжевые двойственные оценки для ряда задач.
2. Для задач максимизации квадратичной функции с бинарными или булевыми переменными построены квадратичные экстремальные задачи, которым соответствуют более точные верхние оценки. Для описания множества допустимых решений в задаче нахождения экстремума квадратичной функции от n бинарных переменных введен бинарный квадратичный многогранник. Для него построена полиэдральная аппроксимация сверху, которая для двух, трех и четырех переменных является точной.

3. Для числа устойчивости (независимости) графа построены новые верхние оценки, которые уточняют наилучшую из предложенных Н.З. Шором верхних оценок. Экспериментально показано, что новые оценки являются точными для графа в форме икосаэдра и дополнительного к нему графа.
4. Построены новые квадратичные модели для взвешенного максимально-го разреза графа (MaxCut-задача), для которых соответствующие верхние оценки являются не хуже, чем лучшая из двух оценок – Барахоны – Маджуба (1986 г.) и Шора – Березовского (1995 г.). Показано, что на основе третьей модели можно построить „усиленные“ аналоги оценки Барахоны-Маджуба в MaxCut-задачах.

Результаты опубликованы в пяти¹ статьях (из них все в фаховых изданиях) и докладывались на пяти² конференциях различного уровня.

¹[82] Стецюк П.И. О функционально избыточных ограничениях для булевых оптимизационных задач квадратичного типа // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – №6. – С. 168–172. [83] Стецюк П.И. Новые модели квадратичного типа для задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Кибернетика и системный анализ.– 2006. – №1. – С. 63–75. [85] Стецюк П.И., Пардалос П.М. Об уточнении лагранжевых двойственных оценок в бинарных и булевых квадратичных задачах // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – С. 145–153. [86] Стецюк П.И., Пардалос П.М., Крошко Д.Л. О новых лагранжевых двойственных оценках для числа устойчивости графа // Компьютерная математика. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – Выпуск 3. – С. 149–158. [102] Стецюк П.И., Золотых Н.Ю. Бинарный квадратичный многогранник и его аппроксимации // Журнал обчислювальної та прикладної математики, №2(101), 2010. – С. 76–86.

²[204] STETSUK P.I., BARADYUM T.O. The Use of Odd Sets of Variables to Improve Bounds in Boolean Quadratic Problems // Abstracts of International Conference in Honor of the 70th Birthday of Academician I.V.Sergienko "Applied Optimization and Metaheuristic Innovations"(July 19-1, 2006, Yalta, Ukraine) [87] Стецюк П.И. Об уточнении верхних оценок Н.З. Шора для числа независимости неориентированного графа // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. № 11. Научное издание. Екатеринбург: УрО РАН, 2007. [104] Стецюк П.И. Оценки Шора в квадратичных экстремальных задачах // Материалы международной научной конференции "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии", 24–26 марта 2010, Кишинэу, Академия транспорта, информатики и коммуникаций. – С. 19–25. [103] Стецюк П.И. Оценки Н.З.Шора в квадратичных экстремальных задачах и их применение в комбинаторной оптимизации // Российская конференция "Дискретная оптимизация и исследование операций": Материалы конференции (Алтай, 27-июня - 3 июля 2010). – Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2010. – С. 60–64. [28] Золотых Н.Ю., Стецюк П.И. О внешней аппроксимации бинарного и булевого квадратичных многогранников // V-а Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень", Ужгород, 27 вересня – 1 жовтня 2010. Праці школи-семінару. – С. 103–104.

Раздел 5

ЛП-ориентированные оценки для взвешенного числа устойчивости графа

В разделе обсуждаются оценки сверху для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа – простая и улучшенная оценки Н.З. Шора, а также ряд верхних оценок, которые являются решением той или иной задачи линейного программирования (ЛП-ориентированные оценки). В подразделе 5.1 исследуются свойства улучшенной оценки Шора и обсуждаются новые семейства графов, для которых взвешенное число устойчивости можно найти за полиномиальное время [90]. В подразделе 5.2 исследуются ЛП-ориентированные оценки, которые базируются на аппроксимации многогранника устойчивых множеств с помощью линейных неравенств для нечетных циклов и p -колес в графе [91, 95]. В подразделах 5.3 и 5.4 построены ЛП-оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ и $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$, которые являются точными для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов [88, 98].

5.1 О новых свойствах оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа

Предметом исследования в этом подразделе будут новые свойства оценок Шора для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа. Они позволяют выделить такие подклассы этой NP-трудной задачи, которые разрешимы за полиномиальное время.

Задача о вычислении взвешенного числа устойчивости графа и задача об определении наибольшего взвешенного устойчивого множества вершин графа относятся к классу NP-трудных задач. Обе они связаны с неориентированным графом, вершинам которого приписаны целые веса, однако это две принципиально разные задачи, и решение первой не слишком помогает при попытках решить вторую.

Для случая, когда все веса вершин графа равны единице, сами задачи и различие между ними можно продемонстрировать на примере известной проблемы восьми ферзей, которую связывают с именем К. Гаусса. Эта проблема состоит в нахождении наибольшего числа ферзей, которые можно расставить на шахматной доске так, чтобы они не атаковали друг друга. Очевидно, что таких ферзей не может быть более восьми, т.к. никакие два из них не должны находиться на одной вертикали или горизонтали.

Этой задаче можно сопоставить неориентированный граф, вершинам которого соответствуют клетки шахматной доски, а ребрами соединены пары клеток, лежащие на одной вертикали, горизонтали или диагонали. Расстановке ферзей, не бьющих друг друга, будет соответствовать выбор такого подмножества вершин-клеток, в котором ни одна из вершин не соединена с другой. Именно такое подмножество и называется устойчивым.

В графе для задачи о восьми ферзях можно довольно легко найти одну из возможных расстановок (наибольших устойчивых множеств) и поскольку большее число ферзей не может быть расставлено, то число устойчивости этого графа равно 8. Вместе с тем существуют 92 такие расстановки [4], с. 43–44 и понятно, что указать все соответствующие им наибольшие устойчивые множества существенно труднее.

Данный подраздел связан с исследованием верхних оценок для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа, которое является обобщением числа устойчивости. Эти оценки могут быть перенесены на случай взвешенного кликового числа, не менее известной NP-трудной задаче в теории графов. Кликой в неориентированном графе называется подмножество вершин, каждые две из которых соединены ребром. Обе задачи по сути эквивалентны: каждая из них получается из другой, путем построения дополнения графа – такого графа, в котором есть все вершины исходного графа, причем в дополнении графа вершины соединены ребром тогда и только тогда, если они не были соединены в исходном графе. Устойчивое (независимое) множество вершин в исходном графе является кликой в дополнительном гра-

фе к исходному, и наоборот.

Последовательность изложения материала будет следующей. Вначале будет описана задача нахождения взвешенного числа устойчивости неориентированного графа и охарактеризована сложность его нахождения. Далее будет приведена простейшая оценка Шора и ее свойства для слабо двудольных и совершенных графов (связь с числом Ловаса). Затем будет рассмотрена улучшенная оценка Шора и свойства для известных специальных семейств графов, таких как t -совершенные, h -совершенные, и W -совершенные графы. Далее будет показано, что свойства улучшенной оценки Шора позволяют выделить новые семейства графов, для которых взвешенное число устойчивости может быть найдено за полиномиальное время.

Взвешенное число устойчивости $\alpha(G, w)$. Пусть $G=(V, E)$ – взвешенный неориентированный граф (не содержащий петель) с множеством вершин V и множеством ребер E , вес каждой вершины $i \in V$ задан положительным целым числом w_i . Основным объектом наших исследований является так называемое устойчивое (или независимое) множество графа G .

Определение 5.1 *Подмножество вершин $S \subseteq V$ называется устойчивым (или независимым) множеством графа G , если для любых $i, j \in S$ ребро $e = (i, j)$ не принадлежит E .*

Взвешенное число устойчивости графа G определяется следующим образом: $\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in S} w_i$, где $S \subseteq V$ – устойчивое множество. Подмножество S^* , на котором достигается $\alpha(G, w)$, называется максимальным взвешенным устойчивым (или независимым) множеством графа G . В частном случае, когда все веса вершин в графе равны единице, оно совпадает с обычным числом устойчивости графа G , которое принято обозначать $\alpha(G)$. Число устойчивости $\alpha(G)$ характеризует мощность максимального по числу входящих в него вершин устойчивого множества в графе G . В общем случае задача нахождения $\alpha(G, w)$ принадлежит к NP -трудным задачам [175].

Пусть $STAB(G)$ – многогранник устойчивых множеств (stable set polytope), определяемый как выпуклая оболочка булевых индикаторных векторов устой-

чивых множеств S в графе G :

$$STAB(G) = \text{conv}\{x^S, S \text{ — устойчивое множество в графе } G.\} \quad (5.1)$$

Индикаторный вектор множества S определяется как $x^S = (x_i^S, i \in V) \in \{0, 1\}^{|V|}$, где

$$x_i^S = \begin{cases} 1 & \text{если } i \in S; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Условие устойчивости множества S может быть представлено в виде системы квадратичных равенств для компонент вектора x^S :

$$x_i^S x_j^S = 0 \text{ для всех } (i, j) = e \in E.$$

Квадратичные равенства означают, что если две вершины связаны ребром в графе G , то они обе не могут одновременно принадлежать устойчивому множеству S .

Нахождение $\alpha(G, w)$ связано с задачей максимизации линейной функции $\sum_{i \in V} w_i x_i = wx$ на выпуклом многограннике $STAB(G)$:

$$\alpha(G, w) = \max_{x \in STAB(G)} wx = \max_S wx^S, \quad (5.2)$$

где последний максимум берется по всем устойчивым подмножествам из V . Максимум линейной функции в задаче (5.2) достигается в одной или нескольких из вершин многогранника $STAB(G)$. В общем случае $STAB(G)$ имеет сложную структуру, из-за чего задача нахождения $\alpha(G, w)$ принадлежит к NP -трудным задачам.

О полиномиально разрешимых случаях. Полиномиальная разрешимость задачи (5.2) связана с семействами графов, для которых многогранники $STAB(G)$ обладают специфическими свойствами. Связано это с очень простым фактом. Пусть $\mathcal{L}STAB(G)$ – некоторый многогранник, заданный с помощью системы линейных ограничений-неравенств, и аппроксимирующий (сверху) многогранник $STAB(G)$. Тогда решение следующей задачи линейного программирования (ЛП-задачи)

$$\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w) = \max_{x \in \mathcal{L}STAB(G)} \sum_{i \in V(G)} w_i x_i, \quad (5.3)$$

дает оценку $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$, которая является оценкой сверху для $\alpha(G, w)$ (в силу того, что многогранник $\mathcal{L}STAB(G)$ аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$, имеем $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w) \geq \alpha(G, w)$). ЛП-задача (5.3) не обязательно содержит полиномиальное количество линейных ограничений-неравенств. Если для некоторого семейства графов многогранник $\mathcal{L}STAB(G)$ совпадает со многогранником $STAB(G)$, то оценка $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$ для этого семейства графов будет точной ($\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w) = \alpha(G, w)$). Если оценку $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$ можно найти за полиномиальное время, то для любого графа G из этого семейства задача нахождения $\alpha(G, w)$ разрешима за полиномиальное время.

Этот принцип лежит в основе обоснования полиномиальной разрешимости задачи нахождения $\alpha(G, w)$ для слабо двудольных (bipartite), совершенных (perfect), t -совершенных (t -perfect), W -совершенных (W -perfect) и ряда других графов (см. [175], глава 9). За каждым из этих семейств графов стоят свои многогранники вида $\mathcal{L}STAB(G)$, которые имеют даже свои имена, например, $FSTAB(G)$ – дробный многогранник устойчивых множеств (fractional stable set polytope), $QSTAB(G)$ – кликовый многогранник (clique polytope), $CSTAB(G)$ – многогранник нечетных циклов (odd-cycle polytope), $WSTAB(G)$ – „колесный“ многогранник (wheel polytope). Недостаток здесь один: за каждым из указанных семейств графов стоит свой специфический способ нахождения соответствующей ему оценки вида $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$. Так, например, для семейства совершенных графов (для них $STAB(G) = QSTAB(G)$), нахождение $\alpha_Q^*(G, w)$ за полиномиальное время обеспечивает известное число Ловаса $\vartheta(G, w)$ [175], которое для произвольного графа G является более точной оценкой сверху для $\alpha(G, w)$, чем оценка $\alpha_Q^*(G, w)$. Для t -совершенных графов (для них $STAB(G) = CSTAB(G)$) полиномиальная разрешимость задачи нахождения $\alpha(G, w)$ связана со свойствами оценки $\alpha_C^*(G, w)$, которая для произвольного графа G может быть найдена за полиномиальное время. Однако, всем этим полиномиально разрешимым случаям легко придать один и тот же смысл, если использовать верхние оценки для $\alpha(G, w)$, построенные Н.З. Шором в рамках невыпуклых квадратичных задач.

Оценка $\psi(G, w)$, слабо двудольные и совершенные графы. Простейшая верхняя оценка для $\alpha(G, w)$ (условимся называть ее $\psi(G, w)$) предложена Н.З. Шором в [198]. Она связана с формулировкой задачи для $\alpha(G, w)$ в форме следующей невыпуклой квадратичной задачи:

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i \quad (5.4)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.5)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.6)$$

где булева переменная $x_i \in \{0, 1\}$ равна единице, если вершина i включается в устойчивое множество, и равна нулю в противном случае. Здесь булевы переменные описаны равенствами (5.6). Ограничения (5.5) означают, что две вершины не могут одновременно принадлежать устойчивому множеству, если они связаны ребром в графе G .

Оценка $\psi(G, w)$ является двойственной оценкой вида Ψ^* для квадратичной задачи (5.4)–(5.6), алгоритм ее нахождения описан в подразделе 1.3. Оценку $\psi(G, w)$ можно найти с любой заданной точностью за полиномиальное время. Н.З. Шором в [198] показано, что оценка $\psi(G, w)$ совпадает со взвешенным числом Ловаса $\vartheta(G, w)$. Для произвольного графа G имеем

$$\alpha(G, w) \leq \psi(G, w) = \vartheta(G, w).$$

Когда граф G – совершенный или слабо двудольный, то

$$\alpha(G, w) = \psi(G, w) = \vartheta(G, w),$$

и оценка $\psi(G, w)$ является точной для $\alpha(G, w)$. Однако, такой способ обоснования точности оценки $\psi(G, w)$ для этих семейств графов связан со свойствами взвешенного числа Ловаса.

Обоснование того, что простейшая оценка Шора совпадает с $\alpha(G, w)$ для слабо двудольных и совершенных графов можно сделать более наглядным. Оно связано с тем, что из квадратичных ограничений (5.5)–(5.6) следуют

семейства линейных неравенств

$$\text{(vertex constraints)} \quad 0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.7)$$

$$\text{(edge constraints)} \quad x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.8)$$

$$\text{(clique constraints)} \quad \sum_{i \in V(Q)} x_i \leq 1 \quad \forall Q \in G, \quad (5.9)$$

которые выполняются для многогранника $STAB(G)$. Здесь Q – клика (полный подграф) в графе G . „Вершинные“ неравенства (5.7) следуют релаксацией (ослаблением) из ограничений (5.6). Справедливость кликовых неравенств (5.9) показана Н.З. Шором в [198], с. 252, а справедливость реберных неравенств есть следствием кликовых неравенств, когда клика в графе G состоит из двух вершин, т.е. совпадает с ребром графа G .

В результате релаксации квадратичной задачи (5.4)–(5.6) легко получить оценку $\alpha_F^*(G, w)$ для дробного многогранника устойчивых множеств:

$$FSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.7) и (5.8)} \right\},$$

и оценку $\alpha_Q^*(G, w)$ для кликового многогранника

$$QSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.7) и (5.9)} \right\}.$$

Поскольку $QSTAB(G) \subseteq FSTAB(G)$, то для произвольного графа G имеет место неравенство

$$\alpha_F^*(G, w) \geq \alpha_Q^*(G, w) \geq \psi(G, w) \geq \alpha(G, w),$$

из которого следует, что оценка $\psi(G, w)$ является точной как для слабо двудольных, так и для совершенных графов. Для этого достаточно воспользоваться либо тем, что для слабо двудольных графов $\alpha_F^*(G, w) = \alpha(G, w)$ (для них $STAB(G) = FSTAB(G)$ и отсутствуют изолированные вершины), либо тем, что $\alpha_Q^*(G, w) = \alpha(G, w)$ для совершенных графов (для них выполняется $STAB(G) = QSTAB(G)$).

Однако, о точности оценки $\psi(G, w)$ ничего нельзя сказать для других семейств графов. Так, например, даже для t -совершенных графов она не является точной. Улучшить оценку $\psi(G, w)$ можно за счет использования функционально избыточных ограничений.

Оценка $\psi_1(G, w)$ и специальные семейства графов. Улучшенная верхняя оценка Н.З. Шора для $\alpha(G, w)$ (условимся обозначать ее $\psi_1(G, w)$) связана с такой невыпуклой квадратичной задачей:

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i \quad (5.10)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.11)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.12)$$

$$x_i x_k + x_j x_k \leq x_k, \quad \forall (i, j) \in E(G), k \neq i, j, \quad (5.13)$$

Задача (5.11)–(5.13) получена в результате добавления к задаче (5.4)–(5.6) семейства функционально избыточных квадратичных ограничений в форме неравенств (5.13), которые не изменяют множества оптимальных решений квадратичной задачи (5.4)–(5.6). Функционально избыточные ограничения получаются умножением реберных неравенств в форме (5.8) на переменные x_k , такие что $k \neq i, j$. Знак неравенств не изменится, поскольку $x_k = x_k^2 \geq 0$. Именно наличие ограничений (5.13) придает оценке $\psi_1(G, w)$ ряд замечательных свойств для специальных семейств графов.

Оценка $\psi_1(G, w)$ является двойственной оценкой вида Ψ^* для квадратичной задачи (5.10)–(5.13). Оценку $\psi_1(G, w)$ можно найти с любой заданной точностью за полиномиальное время. Конечно, ее нахождение более трудоемко, чем нахождение оценки $\psi(G, w)$, учитывая, что количество множителей Лагранжа увеличено за счет функционально избыточных ограничений (5.13). Следует отметить, что для произвольного графа G оценка $\psi_1(G, w)$ удовлетворяет соотношению

$$\alpha(G, w) \leq \psi_1(G, w) \leq \psi(G, w)$$

и всегда является не менее точной оценкой сверху для $\alpha(G, w)$, чем оценка $\psi(G, w)$. Кроме того, оценка $\psi_1(G, w)$ является точной для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов. Это свойство оценки $\psi_1(G, w)$ следует из того, что Н.З. Шор в [198], с. 252, показал, что из квадратичных ограниче-

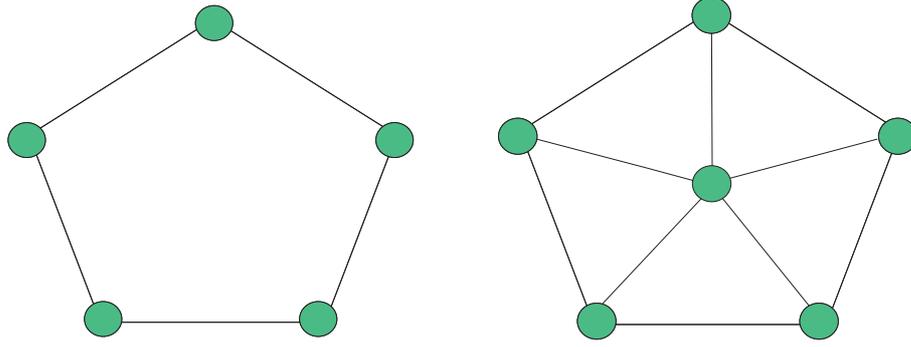


Рис. 5.1. Нечетный цикл C_5 и колесо W_6 (здесь $k = 2$)

ний (5.11)–(5.13) следуют линейные неравенства

$$\text{(odd-cycle constraints)} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in G, \quad (5.14)$$

которые справедливы для многогранника $STAB(G)$. Здесь C_{2k+1} , $k = 1, 2, \dots$ – нечетный цикл в графе G (содержит нечетное количество вершин). Пример нечетного цикла C_5 приведен на рис. 5.1.

Релаксацией квадратичной экстремальной задачи (5.11)–(5.13) легко получить оценку $\alpha_C^*(G, w)$ для многогранника нечетных циклов

$$CSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.7), (5.8) и (5.14)} \right\},$$

которая для произвольного графа G удовлетворяют неравенству

$$\alpha_C^*(G, w) \geq \psi_1(G, w) \geq \alpha(G, w).$$

Из последнего следует, что оценка $\psi_1(G, w)$ совпадает с $\alpha(G, w)$ для t -совершенных графов, для которых $STAB(G) = CSTAB(G)$ и $\alpha_C^*(G, w) = \alpha(G, w)$.

О новых свойствах оценки $\psi_1(G, w)$. Можно ли для улучшенной оценки Шора $\psi_1(G, w)$ показать более сильные результаты о ее точности? Например, будет ли она точной оценкой для $\alpha(G)$ в случае W -совершенных графов? В последних используются линейные неравенства

$$\text{(wheel constraints)} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i + kx_{i_{2k+2}} \leq k, \quad \forall W_{2k+2} \in G, \quad (5.15)$$

которые справедливы для многогранника $STAB(G)$. Здесь W_{2k+2} – колесо (wheel) в графе G (состоит из нечетного цикла C_{2k+1} и одной вершины, свя-

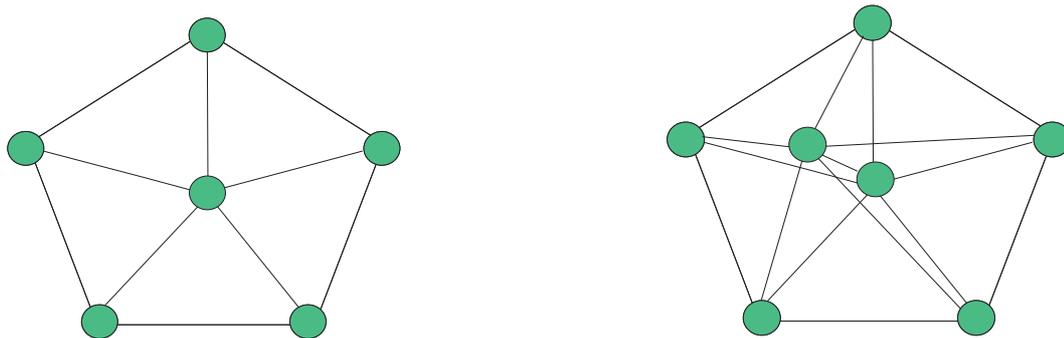


Рис. 5.2. Примеры 1-колеса и 2-колеса на базе нечетного цикла C_5

занной с каждой из вершин нечетного цикла). Пример колеса W_6 , построенного на основе нечетного цикла C_5 , приведен на рис. 5.1. „Колесный“ многогранник (wheel polytope) имеет вид

$$WSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.7), (5.8), (5.14) и (5.15)} \right\}$$

и с ним связана оценка $\alpha_W^*(G, w)$, которая может быть найдена за полиномиальное время для произвольного графа G [175].

Оказывается, что оценка $\psi_1(G, w)$ совпадает с $\alpha(G, w)$ для W -совершенных графов. Более того, это так даже для более сложного семейства графов, чем W -совершенные. Связано это с тем, что из ограничений (5.11)–(5.13) следуют линейные неравенства [89]

$$(p\text{-wheel constraints}) \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i + k \sum_{j \in V(Q_p)} x_j \leq k, \quad \forall W_{2k+1+p} \in G, \quad (5.16)$$

которые справедливы для многогранника $STAB(G)$. Здесь подграф W_{2k+1+p} является p -колесом (p -wheel) [165]. Вершинами p -колеса W_{2k+1+p} служат вершины непересекающихся нечетного цикла C_{2k+1} и клики Q_p (полного подграфа, содержащего p вершин). Множество ребер для W_{2k+1+p} включает все ребра нечетного цикла C_{2k+1} , все ребра клики Q_p , а также ребра, связывающие каждую вершину C_{2k+1} со всеми вершинами клики Q_p . Примеры 1-колеса и 2-колеса на базе нечетного цикла C_5 приведены на рис. 5.2. Неравенства (5.16) означают, что для каждого p -колеса из графа G в устойчивое (независимое) множество может быть включена либо одна из вершин клики Q_p , либо k вершин из нечетного цикла C_{2k+1} . В частном случае, когда клика Q_p

состоит всего из одной вершины, из линейных неравенств для произвольного p -колеса в форме (5.16) следуют линейные неравенства (5.15) для обычных колес W_{2k+2} .

Комбинируя ограничения (5.7), (5.8), (5.9) и (5.14) с ограничениями (5.16), легко построить более сложный класс графов, чем W -совершенные, для которых улучшенная оценка Шора будет точной для $\alpha(G, w)$. Пусть p -колесный многогранник (p -wheel polytope)

$$W_pSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.7), (5.8), (5.14) и (5.16)} \right\},$$

и ему соответствует верхняя оценка

$$\alpha_{W_p}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i, \quad x \in W_pSTAB(G).$$

Справедлива следующая теорема.

Теорема 5.1 *Для произвольного графа G справедливо неравенство*

$$\alpha_{W_p}^*(G, w) \geq \psi_1(G, w) \geq \alpha(G, w). \quad (5.17)$$

Семейство графов, для которых $STAB(G) = W_pSTAB(G)$, назовем W_p -совершенными. Для них $\alpha_{W_p}^*(G, w) = \alpha(G, w)$ и неравенство (5.17) превращается в строгое равенство

$$\alpha_{W_p}^*(G, w) = \psi_1(G, w) = \alpha(G, w), \quad (5.18)$$

из которого вытекает справедливость следующей теоремы.

Теорема 5.2 *Если граф G является W_p -совершенным, то оценка $\psi_1(G, w)$ равна $\alpha(G, w)$.*

Поскольку оценка $\psi_1(G, w)$ с любой заданной точностью может быть найдена за полиномиальное время, из теоремы 5.2 следует, что для любого графа G из семейства W_p -совершенных графов задача нахождения $\alpha(G, w)$ является полиномиально разрешимой.

Полиномиальная разрешимость задач нахождения $\alpha(G, w)$ для совершенных, t - и W -совершенных графов может быть получена путем ослабления

(расширения) многогранника $W_pSTAB(G)$ за счет изъятия некоторых типов неравенств. Так, например, многогранник $CSTAB(G)$ следует из $W_pSTAB(G)$, если отсутствуют p -колесные ограничения. Кликовый многогранник $QSTAB(G)$ получается из многогранника $W_pSTAB(G)$ при $k = 1$ (т.е. рассматриваются только нечетные циклы, совпадающие с 3-кликой) и произвольном p : $1 \leq p \leq |V| - 3$. Здесь неравенства для 2-клик следуют из реберных неравенств (5.8), неравенства для 3-клик – из неравенств для нечетных циклов (5.14) при $k = 1$, а неравенства для клик с большим количеством вершин – из неравенств для p -колес (5.16) при $k = 1$ и произвольном p . Многогранник $WSTAB(G)$ получается из $W_pSTAB(G)$ при $p = 1$. В результате справедливо неравенство

$$\alpha_W^*(G, w) \geq \psi_1(G, w) \geq \alpha(G, w),$$

из которого следует, что оценка $\psi_1(G, w)$ совпадает с $\alpha(G, w)$, если граф G является W -совершенным (для него $\alpha_W^*(G, w) = \alpha(G, w)$).

В заключение отметим, что с помощью оценки Шора $\psi_1^*(G, w)$ можно обосновать полиномиальную разрешимость задачи нахождения взвешенного числа устойчивости графа для более сильного семейства графов, чем W_p -совершенные. Так, например, из ограничений (5.11)–(5.13) следуют справедливые для многогранника $STAB(G)$ линейные неравенства

$$\sum_{i \in V(\overline{C}_{2k+1})} x_i \leq 2, \quad \forall \overline{C}_{2k+1} \in G, \quad (5.19)$$

где \overline{C}_{2k+1} – дополнительный граф для нечетного цикла C_{2k+1} (в зарубежной литературе его принято называть „odd-antihole“). Пример графа \overline{C}_7 приведен на рис. 5.3. Аналогично случаю p -колеса, граф \overline{C}_{2k+1+p} можно определить как расширение \overline{C}_{2k+1} за счет клики Q_p , вершины которой связаны с каждой из вершин \overline{C}_{2k+1} . Из ограничений (5.11)–(5.13) следуют линейные неравенства

$$\sum_{i \in V(\overline{C}_{2k+1})} x_i + 2 \sum_{j \in V(Q_p)} x_j \leq 2, \quad \forall \overline{C}_{2k+1+p} \in G, \quad (5.20)$$

которые справедливы для многогранника $STAB(G)$.

Более того, можно построить еще ряд новых семейств линейных неравенств, которые будут справедливы для многогранника $STAB(G)$ и будут

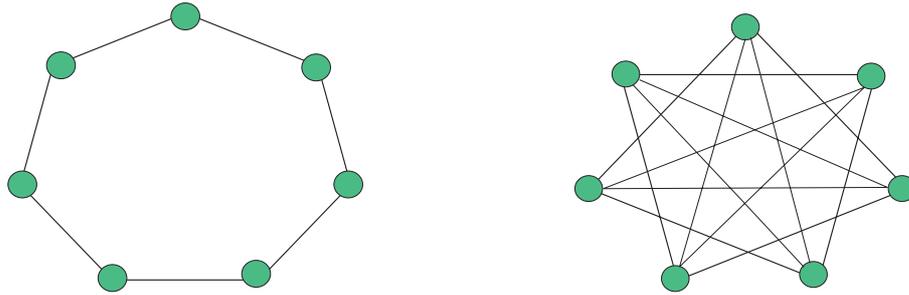


Рис. 5.3. Нечетный цикл C_7 и дополнительный \overline{C}_7 (здесь $k = 3$)

характеризовать более сложные подструктуры в графе, полученные определенной комбинацией клик Q_p , нечетных циклов C_{2k+1} и их дополнений \overline{C}_{2k+1} . Это дает возможность с помощью оценки $\psi_1(G, w)$ указать новые семейства графов, для которых задача (5.2) является полиномиально разрешимой и более того, указать верхнюю границу сложности этих классов задач на основе методов недифференцируемой оптимизации. Это может в значительной мере дополнить имеющиеся результаты в [175, 196] и, возможно, для многих семейств графов найти некоторую единообразную форму описания многогранника вида $\mathcal{LSTAB}(G)$ для внешней аппроксимации многогранника устойчивых множеств $STAB(G)$.

5.2 ЛП-ориентированные верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа

Обсуждаются верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа, которые базируются на аппроксимации многогранника устойчивых множеств с помощью линейных неравенств для нечетных циклов и p -колес в графе. Построены алгоритмы нахождения верхних оценок на основе решения задачи линейного программирования с конечным числом неравенств, которые получены на основе алгоритма кратчайших путей в специальном графе. Приведены результаты экспериментов для графов, содержащих от нескольких сотен до тысячи вершин.

Предметом обсуждения ниже будут верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа, связанные с решением задач линейного программирования (ЛП-задач). Условимся такие оценки называть ЛП-ориентированными

верхними оценками. В самом общем виде их можно описать следующим образом. Пусть $\mathcal{LSTAB}(G)$ – некоторый многогранник, заданный с помощью системы линейных ограничений-неравенств, и пусть многогранник $\mathcal{LSTAB}(G)$ аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$. Тогда ЛП-ориентированная верхняя оценка $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$ связана с решением следующей ЛП-задачи

$$\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i, \quad x \in \mathcal{LSTAB}(G).$$

В силу того, что многогранник $\mathcal{LSTAB}(G)$ аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$, имеем $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w) \geq \alpha(G, w)$, и, следовательно, оценка $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$ всегда является оценкой сверху для $\alpha(G, w)$. Свойства конкретной оценки $\alpha_{\mathcal{L}}^*(G, w)$ зависят от того, с помощью каких подмножеств линейных неравенств описывается многогранник $\mathcal{LSTAB}(G)$.

Оценка $\alpha_C^*(G, w)$ и программы LPCSTAB. Пусть C_{2k+1} , $k = 1, 2, \dots$ – нечетный цикл в графе G . Для многогранника $STAB(G)$ справедливы следующие классы линейных неравенств:

$$\text{(vertex constraints)} \quad 0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.21)$$

$$\text{(edge constraints)} \quad x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.22)$$

$$\text{(odd-cycle constraints)} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in G. \quad (5.23)$$

Они определяют многогранник нечетных циклов (odd-cycle polytope)

$$CSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.21), (5.22) и (5.23)} \right\},$$

который аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$.

Оценка $\alpha_C^*(G, w)$ связана с решением следующей ЛП-задачи

$$\alpha_C^*(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i, \quad x \in CSTAB(G). \quad (5.24)$$

Для произвольного графа G имеет место неравенство $\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha(G, w)$. Если граф G принадлежит семейству t -совершенных графов, для которых $STAB(G) = CSTAB(G)$, то оценка $\alpha_C^*(G, w)$ является точной для $\alpha(G, w)$, т.е. $\alpha_C^*(G, w) = \alpha(G, w)$.

Задача (5.24) в самом общем случае может содержать неполиномиальное количество ограничений, что обусловлено наличием ограничений вида (5.23) для всех возможных нечетных циклов. Несмотря на это, задача (5.24) разрешима за полиномиальное время. В работе [175] описан полиномиальный алгоритм ее решения, базирующийся на использовании метода эллипсоидов и на том факте, что для точки \bar{x} , которая удовлетворяет ограничениям (5.21)–(5.22), за полиномиальное время можно либо убедиться, что точка \bar{x} удовлетворяет ограничениям (5.23) для каждого нечетного цикла, либо найти такой нечетный цикл, для которого ограничение вида (5.23) является максимально нарушенным. Метод из работы [175] имеет теоретическую ценность, однако он малоприменим для практического нахождения оценок $\alpha_C^*(G, w)$.

Если граф содержит несколько сотен вершин, то для вычисления оценки $\alpha_C^*(G, w)$ эффективные алгоритмы можно реализовать на основе современных ЛП-программ, для которых решение ЛП-задач с сотнями переменных и десятками или сотнями тысяч ограничений не представляет особых проблем. Условимся их называть ЛП-ориентированными алгоритмами нахождения $\alpha_C^*(G, w)$ и будем их ориентировать на решение ЛП-задач с конечным числом линейных ограничений. Поэтому в основу ЛП-ориентированного алгоритма для нахождения $\alpha_C^*(G, w)$ положим полиномиальный алгоритм из [175] для нахождения максимального нарушенного ограничения, связанного с нечетным циклом, и следующую ЛП-задачу:

$$f_C^* = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.25)$$

при ограничениях:

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.26)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.27)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in C_{odd} \in G, \quad (5.28)$$

где C_{odd} – конечное множество нечетных циклов (возможно, пустое).

Тогда ЛП-ориентированный алгоритм для нахождения $\alpha_C^*(G, w)$ (условимся называть его *LPCSTABa*) состоит в следующем.

Начальная установка. Положим $itn = 0$ и $C_0 = \emptyset$ (множество нечетных циклов является пустым). Перейдем к шагу 1.

Шаг 1. Имеем множество нечетных циклов C_{itn} . Положим $C_{odd} = C_{itn}$ и, решив ЛП-задачу (5.25)–(5.28), найдем f_C^* и $x^* = (x_1^*, \dots, x_{|V|}^*)$.

Шаг 2. Построим взвешенный неориентированный граф $G' = (V', E')$, где множество вершин $V'(G')$ включает $2|V|$ вершин (вершина i и ее копия i' для всех $i \in V(G)$). Множество ребер $E'(G')$ состоит из ребер, которые соединяют все те пары вершин (i, j') и (i', j) , для которых пара вершин i и j соединена ребром (i, j) в графе G . Присвоим ребрам (i, j') и (i', j) один и тот же положительный вес (длина ребра), равный $1 - x_i^* - x_j^*$.

Шаг 3. Рассмотрим граф G' как ориентированный (ребру (i, j') соответствуют дуги (i, j') и (j', i) с длинами, равными длине ребра (i, j') , т.е. $l(i, j')$) и найдем для каждой вершины $i \in V$ кратчайший путь, который начинается в вершине i и заканчивается в вершине i' (копии вершины i). Число таких кратчайших путей равно $|V|$. Пусть длины найденных кратчайших путей равны l_i , $i = 1, \dots, |V|$.

Шаг 4. Среди найденных $|V|$ кратчайших путей выберем кратчайший путь с минимальной длиной $l^* = \min_{i=1,2,\dots,|V|} (l_i)$ (он не обязательно будет единственным). Если длина $l^* \geq 1$, то $\alpha_C^*(G, w) = f_C^*$ и останов (достаточное условие того, что точка x^* удовлетворяет ограничениям в форме (5.14) для всех нечетных циклов). Иначе переходим к шагу 5.

Шаг 5. Полагаем $C' = C_{2k+1}$, где C_{2k+1} – нечетный цикл, соответствующий вершинам, через которые проходит кратчайший путь минимальной длины, с учетом замены вершин i' на вершины i . Нечетный цикл C' определяет ограничение в форме (5.14), которое в точке x^* является максимально нарушенным (оно не обязательно будет единственным). Перейдем к шагу 6.

Шаг 6. Положим $C_{itn+1} = C_{itn} \cup C'$ и $itn = itn + 1$. Перейдем к шагу 1.

Одна итерация алгоритма *LPCSTABa* требует решения ЛП-задачи (шаг 1) и нахождения $|V|$ раз кратчайшего пути (шаг 3). Если граф G содержит несколько сотен вершин, то добавление к ЛП-задаче ста нечетных циклов равносильно ста итерациям алгоритма и может потребовать значительных затрат по времени. Поэтому алгоритм *LPCSTABa* легко усовершенствовать, если использовать информацию трудоемкого по вычислениям шага 3 и добавить на каждой итерации все те нечетные циклы, для которых ограничение в форме (5.14) было нарушенным. Для модифицированного ЛП-ориентированного алгоритма нахождения $\alpha_C^*(G, w)$ (условимся называть его *LPCSTABb*) шаги 4 и 5 заменяются на следующие.

Шаг 4а. Среди найденных V кратчайших путей оставляем только те, которые определяют нечетный цикл (такая проверка требуется, так как не каждый кратчайший путь определяет нечетный цикл в графе G). Пусть число кратчайших путей, определяющих нечетные циклы, равно n ($n \leq |V|$), и пусть длины этих кратчайших путей равны $l_i, i = 1, \dots, n$. Если все $l_i, i = 1, \dots, n$ не меньше единицы, то $\alpha_C^*(G, w) = f^*$ и останов. Иначе переходим к шагу 5а.

Шаг 5а. Сформируем список нечетных циклов C' , который включает все те нечетные циклы, которые соответствуют кратчайшим путям из $1, \dots, n$, для которых $l_i < 1$. Каждый из нечетных циклов из списка C' определяет ограничение в форме (5.14), которое в точке x^* является нарушенным (не обязательно максимально нарушенным, хотя по крайней мере один из таких нечетных циклов дает максимально нарушенное ограничение). Перейдем к шагу 6.

Оба алгоритма *LPCSTABa* и *LPCSTABb* позволяют найти оценку $\alpha_C^*(G, w)$, и если граф G принадлежит семейству t -совершенных графов, то оценка $\alpha_C^*(G, w)$ будет точной для $\alpha(G, w)$, т.е. $\alpha_C^*(G, w) = \alpha(G, w)$. Однако, время работы каждого из алгоритмов будет разным. Для оценки времени нахождения $\alpha_C^*(G, w)$, когда граф содержит несколько сотен вершин, оба алгоритма были программно реализованы (программы *LPCSTABa* и *LPCSTABb*).

Таблица 5.1. Эксперименты для $\alpha_C^*(G)$

DIMACS-примеры	$ V $	$ E $	$\alpha(G)$	$\alpha_C^*(G)$	Nca	$itnb$	t_a/t_b	Ncb/Nca
c-fat200-1	200	18366	12	66,6667	241	4	43,5	2,2
c-fat200-2	200	16665	24	66,6667	232	4	40,1	2,4
c-fat200-5	200	11427	58	66,6667	237	4	36,1	2,2
johnson 16-2-4	120	1680	8	40,0000	143	4	29,7	2,1
johnson8-2-4	28	210	4	9,3333	32	4	5,8	2,1
johnson8-4-4	70	560	14	23,3333	81	4	14,5	2,1
keller4	171	5100	11	57,0000	211	4	35,1	2,2
hamming6-2	64	192	32	32,0000	0	1	1,0	–
hamming6-4	64	1312	4	21,3333	73	4	14,7	2,2
hamming8-2	256	1024	128	128,0000	0	1	1,0	–
hamming8-4	256	11776	16	85,3333	322	4	50,6	2,1
san200-0.7-2	200	5970	18	66,6667	232	5	30,7	3,3
san200.0.9-1	200	1990	70	70,0000	175	6	14,8	4,7
san200-0.9-2	200	1990	60	66,6667	274	12	12,9	4,7
san200.0.9-3	200	1990	44	66,6667	247	8	17,4	3,7
brock200-1	200	5066	21	66,6667	237	4	31,4	2,9
mann-a27	378	702	126	135,0000	146	7	15,4	1,6
mann-a9	45	72	16	18,0000	12	2	4,2	1,7

Для решения ЛП-задачи использовалась программа SOPLEX [210], а для нахождения кратчайшего пути в ориентированном графе – программа *dikh* (из библиотеки *SPLIB*) [166].

Результаты тестовых экспериментов для сравнения времени работы обоих алгоритмов приведены в таблице 5.1. Вычисления проводились на процессоре AMD Athlon 1,81 GHz. Верхняя оценка $\alpha_C^*(G)$ для взвешенного числа устойчивости графа ($w_i = 1, \forall i \in V(G)$) была вычислена для ряда тестовых примеров из DIMACS-библиотеки [169].

Здесь Nca – максимальное количество включенных в ЛП-задачу программой *LPCSTABa* нечетных циклов. Оно совпадает с количеством итераций, затраченных на нахождение оценки $\alpha_C^*(G)$. Для программы *LPCSTABb* приведено количество итераций ($itnb$). Из таблицы 5.1 легко видеть, что по времени программа *LPCSTABb* всегда выигрывает, иногда существенно, у программы *LPCSTABa* (столбец t_a/t_b), незначительно проигрывая в количестве накопленных нечетных циклов (столбец Ncb/Nca). Например, для графа *hamming8-4* достигнут выигрыш по времени в пятьдесят раз, нечетных цик-

лов накапливается при этом не так уж и много (всего в два раза больше). При этом пришлось решать ЛП-задачу всего 4 раза, а находить кратчайшие пути в ориентированном графе с 256 вершинами и 47104 дугами всего 4×256 раз.

Что можно сказать о точности оценки $\alpha_C^*(G)$ для рассмотренных примеров? В трех случаях (графы `san200.0.9-1`, `hamming6-2` и `hamming8-2`) оценка $\alpha_C^*(G)$ оказалась точной верхней оценкой для $\alpha(G)$. Для графов `hamming6-2` и `hamming8-2` оценка оказалась точной при использовании только реберных ограничений в ЛП-задаче; при этом не было найдено ни одного нечетного цикла (в связи с этим t_a/t_b равно единице). Однако для остальных примеров оценка $\alpha_C^*(G)$ не является точной, и для графов `s-fat200-1` и `hamming8-4` она сильно завышена. В следующих разделах будет рассмотрен улучшенный вариант ЛП-ориентированного алгоритма, который позволит в ряде случаев найти более точные верхние оценки для числа устойчивости этих графов.

Оценка $\alpha_{W_p}^*(G, w)$ и W_p -совершенные графы. Пусть имеется граф W_{2k+1+p} , вершинами которого являются вершины непересекающихся нечетного цикла C_{2k+1} и клики Q_p (полный подграф, содержащий p вершин). Если $p = 1$, то клика состоит из одной вершины. Множество ребер в графе W_{2k+1+p} включает все ребра нечетного цикла C_{2k+1} , все ребра клики Q_p , а также ребра, связывающие каждую вершину C_{2k+1} со всеми вершинами клики Q_p . Граф W_{2k+1+p} называют p -колесом (p -wheel) [165]. С p -колесом связано семейство линейных неравенств

$$(p\text{-wheel constraints}) \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i + k \sum_{j \in V(Q_p)} x_j \leq k, \quad \forall W_{2k+1+p} \in G, \quad (5.29)$$

которые справедливы для многогранника $STAB(G)$. Неравенства (5.29) означают, что для каждого p -колеса из графа G в устойчивое (независимое) множество может быть включена либо одна из вершин клики Q_p , либо k вершин из нечетного цикла C_{2k+1} .

Если к линейным неравенствам, определяющим многогранник $CSTAB(G)$, добавить семейство неравенств (5.29), то получим многогранник

$$W_pSTAB(G) = \left\{ x \in R^{|V|} : x \text{ удовлетворяет (5.21), (5.22), (5.23) и (5.29)} \right\},$$

который аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$.

Оценка $\alpha_{W_p}^*(G, w)$ связана с решением следующей ЛП-задачи

$$\alpha_{W_p}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V(G)} w_i x_i, \quad x \in W_pSTAB(G). \quad (5.30)$$

Если граф G принадлежит семейству W_p -совершенных графов, для которых $STAB(G) = W_pSTAB(G)$, то выполняется $\alpha_{W_p}^*(G, w) = \alpha(G, w)$. Для произвольного графа G всегда имеет место неравенство

$$\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha_{W_p}^*(G, w) \geq \alpha(G, w), \quad (5.31)$$

т.е. оценка $\alpha_{W_p}^*(G, w)$ является верхней оценкой (оценкой сверху) для $\alpha(G, w)$ и она всегда не хуже, чем оценка $\alpha_C^*(G, w)$.

В общем случае нахождение оценки $\alpha_{W_p}^*(G, w)$ является NP-трудной задачей. Более того, NP-трудной является и задача нахождения на основе уже имеющегося нечетного цикла такого p -колеса, для которого в точке $x^* = \{x_1^*, \dots, x_{|V|}^*\}$ максимально нарушается линейное неравенство в форме (5.29). Поэтому взамен оценки $\alpha_{W_p}^*(G, w)$ рассмотрим ослабленную ЛП-ориентированную верхнюю оценку для $\alpha(G, w)$ на основе линейных неравенств для таких p -колес в графе G , которые легко построить. Условимся эту оценку называть оценкой $\alpha_W(G, w)$.

Оценка $\alpha_W(G, w)$ и программа LPWSTAB. В основу алгоритма для нахождения оценки $\alpha_W(G, w)$ положим следующее. На каждой итерации алгоритма будем решать ЛП-задачу в следующей форме:

$$f_W^* = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.32)$$

при ограничениях:

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V(G), \quad (5.33)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E(G), \quad (5.34)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in C_{odd} \in G, \quad (5.35)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i + k \sum_{j \in V(Q_p)} x_j \leq k, \quad \forall W_{2k+1+p} \in W_{odd} \in G, \quad (5.36)$$

где C_{odd} и W_{odd} – конечные множества нечетных циклов и p -колес (возможно, пустые). Для формирования множества нечетных циклов будем использовать алгоритм нахождения нечетных циклов из [175], используя $x^* = \{x_1^*, \dots, x_{|V|}^*\}$ – оптимальное решение ЛП-задачи (5.32)–(5.36). Для формирования множества p -колес будем использовать уже найденные нечетные циклы и дополнять их до p -колес с помощью простейшего по количеству вычислений алгоритма (по типу алгоритма „жадного“). Условимся такой алгоритм называть алгоритмом „последовательного включения наилучших вершин“.

Пусть i_1, \dots, i_{2k+1} – вершины, через которые проходит нечетный цикл C_{2k+1} и вектор x^* – оптимальное решение ЛП-задачи (5.32)–(5.36). Чтобы на основе нечетного цикла C_{2k+1} построить p -колесо в алгоритме „последовательного включения наилучших вершин“ требуется выполнение следующей последовательности действий. Найдем подмножество вершин из $V(G)$, для которого каждая из входящих в него вершин связана со всеми вершинами нечетного цикла C_{2k+1} . Если такое подмножество вершин непусто, то выберем из него ту вершину, для которой значение компоненты вектора x^* является максимальным, и добавим его к множеству вершин с номером $(2k+2)$. В результате получим 1-колесо с множеством вершин $i_1, \dots, i_{2k+1}, i_{2k+2}$. Для него точно также найдем подмножество вершин из $V(G)$, для которого каждая из входящих в него вершин связана со всеми вершинами 1-колеса. Если подмножество вершин непусто, то выберем вершину с максимальным значением компоненты вектора x^* и добавим к множеству вершин с номером $(2k+3)$. В результате получим 2-колесо с множеством вершин $i_1, \dots, i_{2k+1}, i_{2k+2}, i_{2k+3}$. Для него применим такую же процедуру и либо получим 3-колесо, либо прервем процесс, если 3-колеса не существует (подмножество вершин из $V(G)$, связанных с каждой из вершин 2-колеса окажется пустым). Пусть 3-колесо получено. Будем продолжать процесс далее до тех пор, пока подмножество

вершин из $V(G)$, связанных с каждой из вершин уже найденного p -колеса, не окажется пустым.

Алгоритм для нахождения оценки $\alpha_W(G, w)$ (назовем его *LPWSTAB*) состоит в следующем.

Начальная установка. Положим $itn = 0$ и $C_0 = \emptyset$, $W_0 = \emptyset$ (множества нечетных циклов и p -колес являются пустыми). Перейдем к шагу 1.

Шаг 1. Имеем множество нечетных циклов C_{itn} и множество p -колес W_{itn} .

Положим $C_{odd} = C_{itn}$, $W_{odd} = W_{itn}$ и, решив ЛП-задачу (5.32)–(5.36), найдем f_W^* и $x^* = (x_1^*, \dots, x_{|V|}^*)$.

Шаг 2. Построим взвешенный неориентированный граф $G' = (V', E')$. Множество вершин $V'(G')$ включает вершину i и ее копию i' для всех $i \in V(G)$. Множество ребер $E'(G')$ состоит из ребер, которые соединяют все те пары вершин (i, j') и (i', j) , для которых вершины i и j соединены ребром (i, j) в графе G . Присвоим ребрам (i, j') и (i', j) один и тот же положительный вес (можно считать его длиной ребра) $l(i', j) = l(i, j') = 1 - x_i^* - x_j^*$.

Шаг 3. Рассмотрим граф G' как ориентированный (ребру (i, j') соответствуют дуги (i, j') и (j', i) с длинами, равными длине ребра (i, j') , т.е. $l(i, j')$), и для каждой вершины $i \in V$ найдем кратчайший путь, который начинается в вершине i и заканчивается в вершине i' (копии вершины i). Число таких кратчайших путей равно $|V|$. Из них оставляем только те, которые определяют нечетный цикл. Пусть число таких кратчайших путей равно n ($n \leq |V|$). Найдем нечетные циклы $C_{2k_1+1}, \dots, C_{2k_n+1}$ (они соответствуют n найденным кратчайшим путям).

Шаг 4. Установим множества C' и W' пустыми и будем их заполнять следующим образом. Каждый из нечетных циклов C_{2k_i+1} для $i = 1, \dots, n$ с помощью алгоритма „последовательного включения наилучших вершин“ дополняем до p -колеса в графе G . Пусть такое p -колесо получено. Если линейное неравенство в форме (5.16) для него нарушено, то найденное p -колесо включаем в множество W' . Если построить p -колесо на базе

нечетного цикла не удалось, но линейное неравенство в форме (5.14) для этого нечетного цикла является нарушенным, то такой нечетный цикл включаем в множество C' . Если после завершения этой процедуры для всех $i = 1, \dots, n$ оба множества C' и W' пусты, то $\alpha_W(G, w) = f_W^*$ и останов. Иначе перейдем к шагу 5.

Шаг 5. Положим $C_{itn+1} = C_{itn} \cup C'$ и $W_{itn+1} = W_{itn} \cup W'$ и $itn = itn + 1$.
Перейдем к шагу 1.

ЛП-задача (5.32)–(5.36) построена как расширение ЛП-задачи (5.25)–(5.28) за счет конечного набора справедливых для p -колес линейных неравенств в виде (5.36). Поэтому оценку $\alpha_W(G, w)$ можно рассматривать как улучшение оценки $\alpha_C^*(G, w)$ с помощью использования линейных неравенств для p -колес в графе G . В результате она будет сохранять свойства оценки $\alpha_C^*(G, w)$, а в случае обнаружения p -колес, для которых линейные неравенства в форме (5.16) являются нарушенными, оценка $\alpha_W(G, w)$ может оказаться более точной верхней оценкой для $\alpha(G, w)$, чем оценка $\alpha_C^*(G, w)$.

С целью проверки свойств оценки $\alpha_W(G, w)$ алгоритм реализован в программе *LPWSTAB* на языке C++. Для решения ЛП-задачи использована программа *SOPLEX* [210], а для нахождения кратчайшего пути в ориентированном графе – программа *dikh* [166]. В программе *LPWSTAB* используется параметр ε , который означает, что линейные неравенства, связанные с нечетным циклом C_{k+1} и p -колесом W_{2k+1+p} , считаются нарушенными (в точке x^*) и включаются в ЛП-задачу, если для них выполняются условия:

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i^* \geq k + \varepsilon \quad \text{и} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i^* + k \sum_{j \in V(Q_p)} x_j^* \geq k + \varepsilon.$$

Первая серия экспериментов с программой *LPWSTAB* заключалась в проверке точности оценки $\alpha_W(G, w)$, где $w_i = 1, \forall i \in V(G)$, для того же набора *DIMACS*-графов, для которых вычислялась оценка $\alpha_C^*(G)$. Рассматривались 16 графов. Исключены только два графа *hamming6-2* и *hamming8-2*, для которых не требовалось включения ни одного нечетного цикла. Для программы *LPWSTAB* использовалось значение $\varepsilon = 0.01$. Результаты эксперимента

Таблица 5.2. Эксперименты для $\alpha_W(G)$

DIMACS-примеры	$ V $	$\alpha(G)$	$\alpha_W(G)$	itn	t_W	N	NC	NW	NQ
c-fat200-1	200	12	12,00	31	485,8	5787	0	0	5787
c-fat200-2	200	24	24,00	17	219,5	3342	0	12	3330
c-fat200-5	200	58	66,66	3	29,0	533	533	0	0
johnson 16	120	8	8,00	3	2,3	128	36	7	85
johnson8-2	28	4	4,00	3	0,7	41	8	7	26
johnson8-4	70	14	14,00	3	1,0	139	12	4	123
keller4	171	11	14,82	14	32,8	1151	41	36	1074
hamming6-4	64	4	5,33	5	2,1	301	0	16	285
hamming8-4	256	16	16,00	5	54,8	1144	48	48	1048
san200-0.7	200	18	19,35	18	58	1569	134	1	1434
san200.0.9-1	200	70	70,00	4	6,4	663	646	1	16
san200-0.9-2	200	60	60,00	11	16	1369	1299	0	70
san200.0.9-3	200	44	44,00	21	23,4	1526	1378	0	148
brock200-1	200	21	38,58	32	88,5	1543	227	28	1288
mann-a27	378	126	135,00	7	5,1	245	245	0	0
mann-a9	45	16	18,00	1	0,5	21	21	0	0

отражены в таблице 5.2. Здесь для каждого из 16 графов приведены значение оценки $\alpha_W(G)$ и затраты на ее нахождение – количество итераций (столбец itn) и время в секундах на процессоре AMD Athlon 1,81 GHz (столбец t_W). Остальные столбцы в таблице характеризуют структуру накопленных программой *LPWSTAB* (включенных в ЛП-задачу на последней итерации) линейных неравенств, исключая „реберные“ неравенства. Здесь столбец N задает полное количество включенных в ЛП-задачу линейных неравенств, а в столбцах NC , NW и NQ указано сколько среди них было нечетных циклов (сюда же включены и 3-клики), p -колес с $k \geq 2$ и клик, которые получены как p -колеса при $k = 1$ и произвольных p .

Из таблицы 5.2 видно, что оценка $\alpha_W(G)$ является точной оценкой для $\alpha(G)$ для 9 графов из 16. Структура накопленных неравенств для графа san200.0.9-1 дает возможность утверждать, что он не может быть t -совершенным, хотя для него оценка $\alpha_C^*(G)$ есть точной верхней оценкой для $\alpha(G)$ (см. таблицу 5.1). Такой вывод позволяют сделать 16 накопленных 4-клик (см. столбец NQ в таблице 5.2), и, следовательно, для графа san200.0.9-1 можно подобрать такие веса вершин, что оценка $\alpha_C^*(G, w)$ не будет точной

для $\alpha(G, w)$.

Кроме тестовых примеров из DIMACS-библиотеки, программа LPWSTAB была проверена на тестовых задачах для нахождения оценок максимального объема помехоустойчивых кодов. Описание этих тестовых задач можно найти на сайте <http://www.research.att.com/~njas/doc/graphs.html>. Так, например, для всех тестовых задач, связанных с корректированием единичной ошибки в Z -канале, программа LPWSTAB нашла верхние оценки для максимального объема кода, которые совпали с числом Ловаса. Для тестовой задачи, где граф включает 1024 вершин и 33280 ребер, программа затратила время $t = 1139$ сек. на процессоре AMD Athlon. При этом пришлось решать ЛП-задачу 12 раз и находить кратчайшие пути в ориентированном графе (содержит 2048 вершин и 133120 дуг) 12×1024 раз. Количество накопленных неравенств при этом составило 2768 – из них 249 нечетных циклов, 2468 клик и 51 p -колесо.

Вторая серия экспериментов для программы LPWSTAB связана с ЛП-задачей, которая соответствует оценке $\alpha_W(G)$. Целью экспериментов было выяснить: насколько быстрее с помощью программ для решения задачи целочисленного линейного программирования можно решить булеву ЛП-задачу, подготовленную программой LPWSTAB, чем булеву ЛП-задачу с реберными ограничениями (включает только линейные неравенства для всех ребер графа). Для этой цели была выбрана свободно распространяемая программа SCIP (Solving Constraint Integer Programming) [150]. Для тех же наборов DIMACS-графов результаты экспериментов отражены в таблице 5.3.

Здесь N_{SCIP} – количество переменных в обеих булевых ЛП-задачах (равно количеству вершин графа), M_{ESCIPI} – количество ограничений в булевой ЛП-задаче с реберными ограничениями (равно количеству вершин и ребер в графе), M_{WSCIP} – количество ограничений в булевой ЛП-задаче для оценки $\alpha_W(G, w)$ (равно сумме количества вершин и ребер в графе и накопленных программой LPWSTAB линейных неравенств), M_{SCIP} – количество ограничений в булевой ЛП-задаче, которое осталось после препроцессинга программы

Таблица 5.3. Эксперименты для программы SCIP

DIMACS-примеры	N_{SCIP}	M_{ESCIPI}	t_{ESCIPI}	M_{WSCIP}	M_{SCIP}	t_{WSCIP}	$\frac{t_{ESCIPI}}{t_{WSCIP}}$
c-fat200-1	200	18366	1041	24353	5420	125	8,33
c-fat200-2	200	16665	410	20207	5284	91	4,51
c-fat200-5	200	11427	1194	12160	10831	1472	0,81
johnson 16-2-4	120	1680	1,41	1928	48	0,14	10,07
johnson8-2-4	28	210	0,04	237	16	0,03	1,33
johnson8-4-4	70	560	1,64	769	135	0,09	18,22
keller4	171	5100	829	6422	1155	259	3,20
hamming6-4	64	1312	10,1	1677	209	2,31	4,39
hamming8-4	256	11776	746	13176	1324	26,64	28,00
san200-0.7-2	200	5970	410	7739	2213	112	3,66
san200.0.9-1	200	1990	5,5	2853	2312	2,39	2,30
san200-0.9-2	200	1990	13,3	3559	2638	4,09	3,25
san200.0.9-3	200	1990	111,9	3716	2562	346	0,32
brock200-1	200	5066	22766	6809	2515	8065	2,82
mann-a27	378	702	359	1325	597	55	6,50
mann-a9	45	72	0,21	138	58	0,26	0,91

SCIP (задача с этим количеством ограничений является стартовой для метода ветвей и границ, используемого в программе *SCIP*), t_{ESCIPI} и t_{WSCIP} – времена решения программой *SCIP* булевой ЛП-задачи с реберными ограничениями и булевой ЛП-задачи для оценки $\alpha_W(G)$, соответственно. Последний столбец характеризует отношение затрат по времени решения обеих булевых ЛП-задач: здесь указано, во сколько раз быстрее программа *SCIP* справилась с решением булевой ЛП-задачи для оценки $\alpha_W(G)$, чем с решением булевой ЛП-задачи для реберных ограничений.

Из таблицы 5.3 видно, что булева ЛП-задача для оценки $\alpha_W(G)$ проиграла только в четырех случаях: незначительно для графов c-fat200-5, san200-0.9-2 и mann-a9 и существенно (почти в три раза) для графа san200.0.9-3. Зато в остальных случаях булева ЛП-задача для оценки $\alpha_W(G)$ выиграла, и даже очень существенно (более, чем в 20 раз для графа hamming8-4, более, чем в 8 раз для графа c-fat200-1, более, чем в 4 раза для графа c-fat200-2, почти в 4 раза для графа keller4, более, чем в два раза для графа san200-0.7-2, более, чем в 6 раз для графа mann-a27). Наиболее существенный выигрыш по реальному времени получился для графа brock200-1 – 2 часа 13 минут против

6 часов 19 минут. Для графов johnson 16-2-4, johnson8-2-4 и johnson8-4-4 общее время решения обеих булевых ЛП-задач очень мало. Здесь представляет интерес количество линейных неравенств, которые оставлены в булевых ЛП-задачах после препроцессинга. Оно невелико по сравнению с количеством вершин в этих графах, и это объясняется нахождением программой LPWSTAB достаточно „хороших“ кликовых ограничений, которые сравнительно небольшим количеством покрывают вершины графа.

С помощью программы SCIP и подготовленной программой LPWSTAB ЛП-задачи для оценки $\alpha_W(G)$ найдена точная верхняя оценка для максимального объема кода, корректирующего одно удаление бита, граф 1dc1024. Здесь затраты по времени составили 55 часов на процессоре AMD Athlon 1,81 GHz. Это значительно меньше, чем соответствующее время, указанное на сайте <http://www.research.att.com/~njas/doc/graphs.html>. Оно равно 298 часам и было достигнуто с помощью метода ветвей и границ и оценок Ловаса на более мощном по сравнению с нашим компьютере IBM P690. Для графа 1dc1024 оценка $\alpha_W(G)$ равна 96.412 (точное решение $\alpha(G) = 94$). Программа LPWSTAB накопила 3483 неравенств (из них 276 – нечетных циклов, 3154 – клик, 53 – p -колес) и затратила 1128,7 секунд. Булева ЛП-задача содержала 28570 линейных неравенств до препроцессинга и 2162 линейных неравенства после препроцессинга программы SCIP.

5.3 ЛП-оценка $\alpha_\Delta^*(G, w)$ и t -совершенные графы

Для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа G выведена верхняя оценка, которая является решением задачи линейного программирования с количеством ограничений $O(|V|^3)$, где V – количество вершин в графе. Доказано, что эта оценка является не менее точной, чем известная оценка, связанная с многогранником $CSTAB(G)$, и является точной оценкой сверху для взвешенного числа устойчивости t -совершенного графа.

Об оценке $\alpha_C^*(G, w)$. Одним из семейств графов, для которых $\alpha(G, w)$ можно найти за полиномиальное время, являются t -совершенные графы [175,

196]. Их название происходит от французского слова „trou“, которое в переводе на русский язык означает „дыра“. Оно выделяет нечетный цикл в графе G (содержит нечетное количество вершин), который является центральным при определении t -совершенных графов. Нечетный цикл в графе G далее будем обозначать C_{2k+1} , $k = 1, 2, \dots$, а соответствующее ему подмножество вершин графа через $V(C_{2k+1})$.

Оценка $\alpha_C^*(G, w)$ является границей сверху для $\alpha(G, w)$ и связана с многогранником

$$CSTAB(G) = \begin{cases} 0 \leq x_i \leq 1 & \text{для каждой вершины } i \in V, \\ x_i + x_j \leq 1 & \text{для каждого ребра } (i, j) \in E, \\ \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k & \text{для каждого нечетного цикла } C_{2k+1} \in G, \end{cases}$$

который аппроксимирует (сверху) многогранник $STAB(G)$. Для ее нахождения требуется решить задачу линейного программирования (ЛП-задачу)

$$\alpha_C^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i, \quad x \in CSTAB(G), \quad (5.37)$$

которая в общем случае содержит неполиномиальное количество ограничений.

Определение 5.2 t -совершенными графами называют семейство графов, для которых многогранник устойчивых множеств $STAB(G)$ совпадает с многогранником $CSTAB(G)$ ($STAB(G) = CSTAB(G)$).

Для t -совершенных графов оценка $\alpha_C^*(G, w)$ является точной оценкой для $\alpha(G, w)$, т.е. справедливо равенство

$$\alpha_C^*(G, w) = \alpha(G, w). \quad (5.38)$$

Многогранник $CSTAB(G)$ можно описать с помощью полиномиального количества линейных ограничений [196], стр. 1187, используя переменные y_{ij} для каждого ребра $(i, j) \in E$ и переменные $z_{u,v}$ для каждого $u, v \in V$. Область действия ограничений, связанных с нечетным циклом, эквивалентна следу-

ющей системе линейных ограничений:

$$\begin{cases} y_{ij} = 1 - x_i - x_j & \text{для каждого ребра } (i, j) \in E, \\ z_{v,v} \geq 1 & \text{для каждой вершины } v \in V, \\ z_{u,v} \leq y_{uv} & \text{для каждого ребра } (u, v) \in E, \\ z_{t,w} \leq z_{t,v} + y_{uv} + y_{vw} & \text{для всех } t, u, v, w \in V : (u, v), (v, w) \in E. \end{cases} \quad (5.39)$$

Таким образом, для t -совершенных графов $\alpha(G, w)$ может быть найдено за полиномиальное время с помощью любого из полиномиальных алгоритмов для задачи линейного программирования. При этом ЛП-задача, построенная на основе системы (5.39), содержит $O(|V|^2|E|)$ ограничений.

Ниже будет построена оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$, нахождению которой соответствует ЛП-задача с количеством ограничений $O(|V|^3)$, которое меньше, чем дает система (5.39). Покажем, что ЛП-оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ является не менее точной оценкой сверху для $\alpha(G, w)$, чем оценка $\alpha_C^*(G, w)$. Естественно, что оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ будет точной для $\alpha(G, w)$, если граф G является t -совершенным.

Вывод ЛП-оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$. ЛП-задача для оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ получена релаксацией из квадратичной задачи для нахождения $\alpha(G, w)$. Построение этой ЛП-задачи опишем последовательностью этапов, которые будем комментировать необходимыми сведениями.

Этап 1. Рассмотрим задачу о максимальном взвешенном устойчивом множестве графа G в форме следующей квадратичной булевой задачи [198]

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.40)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.41)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V, \quad (5.42)$$

где булева переменная $x_i \in \{0, 1\}$ равна единице, если вершина i включается в устойчивое множество, и равна нулю в противном случае. Булевы переменные описаны квадратичными ограничениями-равенствами (5.42). Квадратичные ограничения (5.41) означают, что если две вершины связаны ребром в графе G , то они обе не могут одновременно принадлежать независимому множеству.

Этап 2. Переформулируем задачу (5.40)–(5.42) с помощью бинарных (± 1) -переменных

$$y_i = 1 - 2x_i \quad \forall i \in V, \quad (5.43)$$

где вершине i соответствует бинарная переменная y_i , которая равна -1 , если вершина i включается в устойчивое множество, и равна 1 в противном случае. В результате получаем квадратичную задачу для бинарных переменных в следующей формулировке:

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V} \left(\frac{w_i}{2} - \frac{w_i y_i}{2} \right) \quad (5.44)$$

при ограничениях

$$y_i y_j - y_i - y_j + 1 = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.45)$$

$$y_i^2 = 1 \quad \forall i \in V. \quad (5.46)$$

Этап 3. Добавим к задаче (5.44)–(5.46) следующее семейство квадратичных ограничений

$$\begin{cases} +y_i y_j + y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j - y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j + y_i y_k - y_j y_k \geq -1, \\ +y_i y_j - y_i y_k - y_j y_k \geq -1, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k. \quad (5.47)$$

Ограничения (5.47) не изменяют множество оптимальных решений задачи (5.44)–(5.46) (см. лемму 4.2). Они следуют из того, что для произвольной тройки бинарных (± 1) -переменных y_i , y_j и y_k , такой что $i \neq j \neq k$ всегда выполняются квадратичные ограничения в форме неравенств

$$\begin{cases} (+y_i + y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (-y_i + y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (+y_i - y_j + y_k)^2 \geq 1, \\ (+y_i + y_j - y_k)^2 \geq 1, \end{cases}$$

Последние легко преобразовать к виду (5.47) с учетом $y_i^2=1$, $y_j^2=1$ и $y_k^2=1$.

Этап 4. Линеаризуем задачу (5.44)–(5.47), положив $y_{ij}=y_i y_j$ для каждой пары $i, j \in V$, таких что $i < j$ и заменив ограничения (5.46) линейными нера-

венствами $-1 \leq y_i \leq 1 \quad \forall i \in V$. В результате получаем такую ЛП-задачу:

$$\alpha_{\Delta}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} \left(\frac{w_i}{2} - \frac{w_i y_i}{2} \right) \quad (5.48)$$

при ограничениях

$$y_{ij} - y_i - y_j + 1 = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.49)$$

$$-1 \leq y_i \leq 1 \quad i \in V, \quad (5.50)$$

$$\begin{cases} +y_{ij} + y_{ik} + y_{jk} \geq -1, \\ -y_{ij} - y_{ik} + y_{jk} \geq -1, \\ -y_{ij} + y_{ik} - y_{jk} \geq -1, \\ +y_{ij} - y_{ik} - y_{jk} \geq -1, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k. \quad (5.51)$$

Учитывая, что ЛП-задача (5.48)–(5.51) получена „ослаблением“ квадратичной задачи (5.44)–(5.47), то очевидно, что

$$\alpha_{\Delta}^*(G, w) \geq \alpha(G, w). \quad (5.52)$$

Следовательно, оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ является оценкой сверху для взвешенного числа устойчивости $\alpha(G, w)$.

Этап 5. Переформулируем задачу (5.44)–(5.47) с помощью „булевых“ релаксированных переменных. Для этого переменные $y_i, i \in V$ переведем в релаксированные переменные $x_i, i \in V$ с помощью замены (5.43), а переменные y_{ij} в релаксированные переменные x_{ij} с помощью замены

$$y_{ij} = 1 - 2x_{ij} \quad \forall i, j \in V : i < j. \quad (5.53)$$

В результате получаем, что оценке $\alpha_{\Delta}^*(G)$ соответствует такая ЛП-задача

$$\alpha_{\Delta}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.54)$$

при ограничениях

$$x_i + x_j - x_{ij} = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.55)$$

$$\begin{cases} +x_{ij} + x_{ik} + x_{jk} \leq 2, \\ -x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} \leq 0, \\ -x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} \leq 0, \\ +x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} \leq 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k \quad (5.56)$$

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V. \quad (5.57)$$

ЛП-задача (5.54)–(5.57) содержит $O(|V|^3)$ ограничений. Их точное количество равно $|E| + 2|V| + 2|V|(|V| - 1)(|V| - 2)/3$, и из них самую значительную часть, равную $2|V|(|V| - 1)(|V| - 2)/3$, определяют ограничения (5.56). Эти ограничения, как и их форма (5.51) для „бинарных“ релаксированных переменных, известны как ограничения треугольника (triangle constraints). Их наличие придает ЛП-задаче (5.54)–(5.57) интересные геометрические свойства, связанные с нечетным циклом C_{2k+1} в графе G .

Свойства оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$. Справедлива следующая лемма.

Лемма 5.1 *Из ограничений (5.55) и (5.56) следует справедливость линейных неравенств*

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \text{для каждого нечетного цикла } C_{2k+1} \in G. \quad (5.58)$$

Доказательство. Рассмотрим произвольный нечетный цикл C_{2k+1} с вершинами $\{i_1, \dots, i_{2k+1}\}$ и ребрами (i_r, i_{r+1}) , $r=1, \dots, 2k$, (i_1, i_{2k+1}) . Не ограничивая общности, будем считать что $i_1 < i_2 < \dots < i_{2k+1}$. Для цикла C_{2k+1} ограничения (5.55) имеют следующий вид

$$x_{i_r} + x_{i_{r+1}} = x_{i_r i_{r+1}}, \quad r = 1, 2, \dots, 2k, \quad x_{i_1} + x_{i_{2k+1}} = x_{i_1 i_{2k+1}},$$

и, сложив их, получим

$$2 \sum_{r=1}^{2k+1} x_{i_r} = x_{i_1 i_{2k+1}} + \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r i_{r+1}}. \quad (5.59)$$

Оценим правую часть в равенстве (5.59).

Если $k = 1$ (соответствует нечетному циклу C_3), то для тройки вершин (i_1, i_2, i_3) из первого неравенства в (5.56) следует справедливость такого неравенства:

$$x_{i_1 i_2} + x_{i_1 i_3} + x_{i_2 i_3} \leq 2.$$

Тогда из равенства (5.59) имеем

$$2 \sum_{r=1}^3 x_{i_r} = x_{i_1 i_3} + \sum_{r=1}^2 x_{i_r i_{r+1}} = x_{i_1 i_2} + x_{i_1 i_3} + x_{i_2 i_3} \leq 2,$$

откуда следует

$$\sum_{r=1}^3 x_{i_r} \leq 1 \quad \text{или} \quad \sum_{i \in V(C_3)} x_i \leq 1,$$

что дает доказательство леммы для нечетного цикла C_3 .

Пусть k – произвольное натуральное число, такое что $k \geq 2$. Рассмотрим покрытие вершин нечетного цикла C_{2k+1} двумя типами треугольников (тройками вершин), которое для нечетного цикла C_9 проиллюстрировано на рис. 5.4. Для первого типа треугольников (незаштрихованные) будем использовать

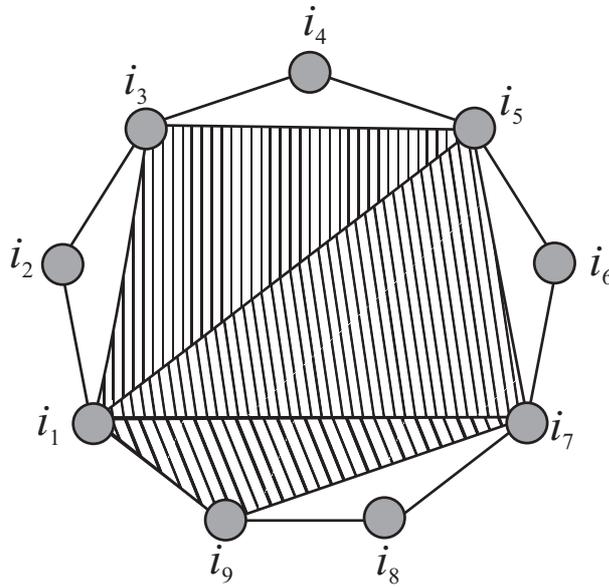


Рис. 5.4. Покрытие треугольниками вершин нечетного цикла C_9

первое неравенство из (5.56), а для второго типа треугольников (заштрихованные) будем использовать третье неравенство из (5.56).

Первый тип треугольников содержит такие тройки вершин: $(i_1, i_2, i_3), \dots, (i_{2k-1}, i_{2k}, i_{2k+1})$. Количество таких троек равно k , и из первого неравенства в (5.56) для них следует справедливость таких неравенств

$$x_{i_{2t-1}i_{2t}} + x_{i_{2t-1}i_{2t+1}} + x_{i_{2t}i_{2t+1}} \leq 2, \quad t = 1, \dots, k.$$

Сложив их, получаем

$$\sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}i_{2t}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}i_{2t+1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t}i_{2t+1}} \leq 2k,$$

что можно записать в такой форме:

$$x_{i_1 i_3} + \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1} i_{2t}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t} i_{2t+1}} \leq 2k. \quad (5.60)$$

Второй тип треугольников содержит такие тройки вершин $(i_1, i_3, i_5), \dots, (i_1, i_{2k-1}, i_{2k+1})$. Количество таких троек равно $(k-1)$, и из третьего неравенства в (5.56) для них следует справедливость таких неравенств

$$-x_{i_1 i_{2t-1}} + x_{i_1 i_{2t+1}} - x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} \leq 0, \quad t = 2, \dots, k,$$

сложив которые, получаем неравенство

$$-x_{i_1 i_3} + x_{i_1 i_{2k+1}} - \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} \leq 0.$$

Сложив последнее с неравенством (5.60) получаем неравенство

$$x_{i_1 i_{2k+1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1} i_{2t}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t} i_{2t+1}} \leq 2k. \quad (5.61)$$

Учитывая, что

$$\sum_{t=1}^k x_{i_{2t} i_{2t+1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1} i_{2t}} = \sum_{t=1}^k (x_{i_{2t-1} i_{2t}} + x_{i_{2t} i_{2t+1}}) = \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r i_{r+1}},$$

из неравенства (5.61) получаем справедливость неравенства

$$x_{i_1 i_{2k+1}} + \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r i_{r+1}} \leq 2k. \quad (5.62)$$

Далее, подставляя (5.62) в (5.59), имеем

$$2 \sum_{r=1}^{2k+1} x_{i_r} = x_{i_1 i_{2k+1}} + \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r i_{r+1}} \leq 2k,$$

откуда следует неравенство

$$\sum_{r=1}^{2k+1} x_{i_r} \leq k \quad \text{или же} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k,$$

что завершает доказательство леммы. \square

Перейдем к исследованию свойств оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$. Справедлива следующая теорема.

Теорема 5.3 Для произвольного графа G оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ удовлетворяет соотношению:

$$\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha_{\Delta}^*(G, w) \geq \alpha(G, w).$$

Доказательство. Тот факт, что $\alpha_{\Delta}^*(G, w) \geq \alpha(G, w)$ следует из определения оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ (см. соотношение (5.52)). Докажем, что $\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha_{\Delta}^*(G, w)$. От задачи (5.54)–(5.57) легко перейти к такой ЛП задаче:

$$\alpha_{\Delta}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.63)$$

при ограничениях

$$x_i + x_j - x_{ij} = 0 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.64)$$

$$\begin{cases} +x_{ij} + x_{ik} + x_{jk} \leq 2, \\ -x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} \leq 0, \\ -x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} \leq 0, \\ +x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} \leq 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V, \quad (5.65)$$

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V, \quad (5.66)$$

$$x_{ij} \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E, \quad (5.67)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E. \quad (5.68)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in G, \quad (5.69)$$

Здесь ограничения (5.67) следуют из ограничений (5.65). Так, сложив первое и последнее из неравенств (5.65), имеем $2x_{ij} \leq 2$, откуда следует справедливость неравенств (5.67). Ограничения (5.68) следуют в результате сложения ограничений (5.64) с ограничениями (5.67). Ограничения (5.69) связаны с нечетными циклами в графе G и следуют из леммы 5.1.

Задача (5.63)–(5.69) включает избыточные линейные ограничения (5.67)–(5.69), которые следуют из ограничений (5.64)–(5.66). От задачи (5.63)–(5.69) легко перейти к „ослабленной“ ЛП-задаче, убрав из нее все ограничения за исключением ограничений (5.66), (5.68) и (5.69). В результате получаем ЛП-задачу

$$\alpha^*(G) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.70)$$

при ограничениях

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V, \quad (5.71)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) \in E. \quad (5.72)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in G, \quad (5.73)$$

для которой $\alpha^*(G) \geq \alpha_{\Delta}^*(G)$. Задача (5.70)–(5.73) является ни чем иным, как формулировкой задачи (5.37) для нахождения $\alpha_C^*(G)$, так как ограничения (5.71)–(5.73) определяют многогранник $CSTAB(G)$. Т.е. $\alpha^*(G) = \alpha_C^*(G)$, откуда $\alpha_C^*(G) \geq \alpha_{\Delta}^*(G)$. Теорема доказана. \square

Из теоремы 5.3 и равенства (5.38), которое означает что для t -совершенных графов оценка $\alpha_C^*(G, w)$ является точной оценкой сверху для $\alpha(G, w)$, следует справедливость теоремы.

Теорема 5.4 *Если граф G – t -совершенный, то $\alpha_{\Delta}^*(G, w) = \alpha(G, w)$.*

Следовательно, для t -совершенных графов оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ является точной верхней оценкой для $\alpha(G)$.

5.4 ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ и t -совершенные графы

Для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа $G = (V, E)$ построена верхняя ЛП-оценка, которая равна оптимальному значению целевой функции в задаче линейного программирования с числом переменных $|V| + |\bar{E}|$ и числом ограничений $O(|V|^3)$, где V – количество вершин в графе, а $|\bar{E}|$ – количество ребер в графе, дополнителном к графу G . Доказано, что она является точной для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов.

ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$. Эта оценка является оценкой сверху для взвешенного числа устойчивости графа и построена подобно тому, как была построена оценка $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$. Оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ получена линейной релаксацией квадратичных ограничений, связывающих между собой тройки булевых переменных, но релаксация здесь осуществляется иначе, чем это имело место при построении оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$.

Нахождению ЛП-оценки $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ соответствует такая ЛП-задача: найти

$$\alpha_{\nabla}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.74)$$

при ограничениях

$$x_{ij} = 0 \quad \forall (i, j) = e \in E, \quad (5.75)$$

$$\begin{cases} -x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} + x_i + x_j + x_k \leq 1, \\ +x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} - x_i \leq 0, \\ +x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} - x_j \leq 0, \\ -x_{ij} + x_{ik} + x_{jk} - x_k \leq 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k, \quad (5.76)$$

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad i \in V. \quad (5.77)$$

Справедлива следующая лемма.

Лемма 5.2 *Для произвольного графа G ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ удовлетворяет соотношению:*

$$\alpha_{\nabla}^*(G, w) \geq \alpha(G, w).$$

Доказательство. За основу возьмем квадратичную булеву формулировку задачи о максимальном взвешенном устойчивом множестве [198]:

$$\alpha(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.78)$$

при ограничениях

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) = e \in E, \quad (5.79)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V. \quad (5.80)$$

Квадратичная задача (5.78)–(5.80) фактически является другой формой записи задачи (5.2), для которой булевы переменные $x_i \in \{0, 1\}$ для всех вершин из V описаны квадратичными ограничениями-равенствами (5.80).

Добавим к задаче (5.78)–(5.80) следующее семейство квадратичных ограничений

$$\begin{cases} +x_i x_j + x_i x_k + x_j x_k - x_i - x_j - x_k \geq -1, \\ -x_i x_j - x_i x_k + x_j x_k + x_i \geq 0, \\ -x_i x_j + x_i x_k - x_j x_k + x_j \geq 0, \\ +x_i x_j - x_i x_k - x_j x_k + x_k \geq 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k. \quad (5.81)$$

Квадратичные ограничения (5.81) не изменяют множества допустимых решений задачи (5.78)–(5.80). Они являются следствием квадратичных неравенств

$$\begin{cases} +y_i y_j + y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j - y_i y_k + y_j y_k \geq -1, \\ -y_i y_j + y_i y_k - y_j y_k \geq -1, \\ +y_i y_j - y_i y_k - y_j y_k \geq -1, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k$$

для бинарных (± 1) -переменных y_i , $i \in V$, если бинарные переменные перевести в булевы $(0-1)$ -переменные x_i , $i \in V$ с помощью следующей замены

$$y_i = 1 - 2x_i \quad \forall i \in V.$$

Линеаризуем задачу (5.78)–(5.81), положив $x_{ij} = x_i x_j \quad \forall i, j \in V : i < j$ и заменив ограничения (5.80) линейными неравенствами $0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V$. Оптимальное значение целевой функции в релаксированной задаче обозначим $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$. В итоге получаем ЛП-задачу (5.74)–(5.77) для величины $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$, которая и названа ЛП-оценкой $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$. Учитывая, что ЛП-задача (5.74)–(5.77) получена в результате ослабления квадратичной задачи (5.78)–(5.81), то ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ для произвольного графа G удовлетворяет соотношению:

$$\alpha_{\nabla}^*(G, w) \geq \alpha(G, w). \quad (5.82)$$

Следовательно, ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ будет оценкой сверху для $\alpha(G, w)$. Соотношение (5.82) доказывает лемму 5.2. \square .

ЛП-задача (5.74)–(5.77) содержит $|V|(|V|+1)/2$ переменных и $O(|V|^3)$ ограничений. Однако, число переменных в ней можно уменьшить. На самом деле $|E|$ линейных переменных, которые соответствуют ребрам графа G и заданы ограничениями (5.75), фиксированы и равны нулю. Это означает, что в ЛП-задаче (5.74)–(5.77) можно избавиться от ограничений (5.75), подставляя нулевые значения для тех переменных, которые они определяют, непосредственно в ограничения (5.76). В результате в новой ЛП-задаче останутся только переменные x_{ij} для тех пар (i, j) , которые не принадлежат множеству ребер E . Все эти пары определяют множество ребер \bar{E} в графе, дополненном к графу G . Число переменных в новой ЛП-задаче будет равным $|V| + |\bar{E}|$,

где $|\bar{E}|$ – количество ребер в графе, дополнительном к графу G . При этом порядок ограничений в новой задаче останется равным $O(|V|^3)$, но реальное число ограничений может уменьшиться. Так, например, если структура графа G такова, что существуют такие тройки вершин i, j и k , для которых все три пары (i, j) , (i, k) и (j, k) принадлежат множеству ребер E , то линейные переменные x_{ij} , x_{ik} и x_{jk} равны нулю из ограничений (5.75). Тогда четыре ограничения в (5.76) вырождаются в единственное ограничение

$$x_i + x_j + x_k \leq 1,$$

так как остальные три ограничения связаны с неотрицательностью переменных x_i , x_j и x_k и дублируются ограничениями (5.77).

ЛП-задача, где отсутствуют ограничения в форме (5.75), будет более экономной для вычисления ЛП-оценки $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ с помощью стандартных ЛП-программ. Однако, мы далее будем придерживаться ее формы записи как ЛП-задачи (5.74)–(5.77), в основном, из-за удобства всех дальнейших доказательств, где будем в явном виде использовать факт равенства нулю тех или иных переменных вида x_{ij} , которые следуют из ограничений (5.75).

ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ и нечетный цикл. Наличие ограничений (5.76) придает ЛП-задаче (5.74)–(5.77) интересные геометрические свойства, связанные с нечетным циклом C_{2k+1} в графе G . Справедлива следующая лемма.

Лемма 5.3 *Из ограничений (5.75) и (5.76) следует справедливость линейных неравенств*

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \text{для каждого нечетного цикла } C_{2k+1} \in G.$$

Доказательство. Рассмотрим произвольный нечетный цикл C_{2k+1} с вершинами $\{i_1, \dots, i_{2k+1}\}$ и ребрами (i_r, i_{r+1}) , $r=1, \dots, 2k$, (i_1, i_{2k+1}) . Не ограничивая общности, будем считать что $i_1 < i_2 < \dots < i_{2k+1}$.

Если $k = 1$ (соответствует нечетному циклу C_3), то для тройки вершин (i_1, i_2, i_3) из первого неравенства из (5.76) имеем:

$$x_{i_1} + x_{i_2} + x_{i_3} \leq 1 + x_{i_1 i_2} + x_{i_1 i_3} + x_{i_2 i_3}.$$

Учитывая, что для ребер (i_1, i_2) , (i_1, i_3) и (i_2, i_3) из равенств (5.75) имеем $x_{i_1 i_2} = 0$, $x_{i_1 i_3} = 0$ и $x_{i_2 i_3} = 0$, то из приведенного выше равенства следует

$$\sum_{r=1}^3 x_{i_r} \leq 1 \quad \text{или} \quad \sum_{i \in V(C_3)} x_i \leq 1,$$

что дает доказательство леммы для нечетного цикла C_3 .

Пусть k – произвольное натуральное число, такое что $k \geq 2$. Рассмотрим покрытие нечетного цикла C_{2k+1} двумя типами треугольников (тройками вершин), которое для нечетного цикла C_9 проиллюстрировано на рис. 5.5. Для

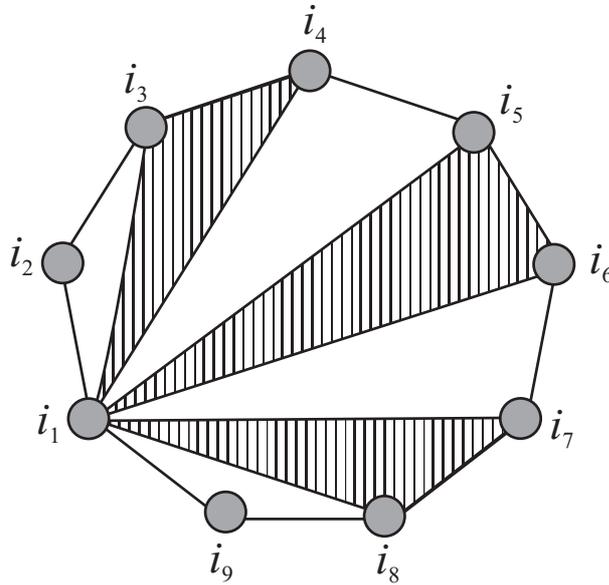


Рис. 5.5. Покрытие нечетного цикла C_9 треугольниками

первого типа треугольников (незаштрихованные) будем использовать первое неравенство из (5.76), а для второго типа треугольников (заштрихованные) будем использовать третье неравенство из (5.76).

Первый тип треугольников содержит такие тройки вершин $(i_{2t-1}, i_{2t}, i_{2t+1})$ для всех $t = 1, \dots, k$ и для каждой пары (i_{2t-1}, i_{2t}) и (i_{2t}, i_{2t+1}) из равенств (5.75) имеем $x_{i_{2t-1} i_{2t}} = 0$ и $x_{i_{2t} i_{2t+1}} = 0$. Для треугольников этого типа из первого неравенства в (5.76) следует справедливость неравенств

$$x_{i_{2t-1}} + x_{i_{2t}} + x_{i_{2t+1}} - x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} \leq 1, \quad t = 1, \dots, k,$$

сложив которые получаем

$$\sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t+1}} - \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}i_{2t+1}} \leq k.$$

Учитывая, что

$$\sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t}} = \sum_{t=1}^k (x_{i_{2t-1}} + x_{i_{2t}}) = \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r},$$

последнее неравенство запишем в такой форме

$$\sum_{r=1}^{2k} x_{i_r} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t+1}} - \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1}i_{2t+1}} \leq k. \quad (5.83)$$

Второй тип треугольников (заштрихованные) составляют тройки вершин $(i_1, i_3, i_5), \dots, (i_1, i_{2k-1}, i_{2k+1})$. Количество таких троек равно $(k-1)$. Из третьего неравенства в (5.76) для них следует справедливость таких неравенств

$$x_{i_1 i_{2t-1}} - x_{i_1 i_{2t+1}} + x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} - x_{i_{2t-1}} \leq 0, \quad t = 2, \dots, k,$$

сложив которые получаем

$$x_{i_1 i_3} - x_{i_1 i_{2k+1}} + \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} - \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1}} \leq 0.$$

Учитывая, что для ребра (i_1, i_{2k+1}) из (5.75) следует $x_{i_1 i_{2k+1}} = 0$, и то, что

$$x_{i_1 i_3} + \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} = \sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} \quad \text{и} \quad \sum_{t=2}^k x_{i_{2t-1}} = \sum_{t=1}^{k-1} x_{i_{2t+1}},$$

последнее неравенство запишем в следующем виде

$$\sum_{t=1}^k x_{i_{2t-1} i_{2t+1}} - \sum_{t=1}^{k-1} x_{i_{2t+1}} \leq 0. \quad (5.84)$$

Сложив неравенства (5.83) и (5.84), получаем

$$\sum_{r=1}^{2k} x_{i_r} + \sum_{t=1}^k x_{i_{2t+1}} - \sum_{t=1}^{k-1} x_{i_{2t+1}} = \sum_{r=1}^{2k} x_{i_r} + x_{2k+1} \leq k,$$

откуда следует

$$\sum_{r=1}^{2k+1} x_{i_r} \leq k \quad \text{или} \quad \sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k, \quad (5.85)$$

что завершает доказательство леммы. \square .

Свойства ЛП-оценки $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$. Связь оценки $\alpha_C^*(G, w)$ с ЛП-оценкой $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ характеризует следующая теорема.

Теорема 5.5 *Для произвольного графа G ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ удовлетворяет соотношению:*

$$\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha_{\nabla}^*(G, w) \geq \alpha(G, w).$$

Доказательство. Из леммы 5.2 следует, что $\alpha_{\nabla}^*(G, w) \geq \alpha(G, w)$. Докажем, что $\alpha_C^*(G, w) \geq \alpha_{\nabla}^*(G, w)$. Вначале покажем, что из ограничений (5.75) и (5.76) следует справедливость линейных неравенств

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) = e \in E. \quad (5.86)$$

Сложим первое неравенство из (5.76) соответственно со вторым, третьим и четвертым неравенствами из (5.76). В результате получаем такие неравенства

$$\begin{cases} -x_{jk} + x_j + x_k \leq 1, \\ -x_{ik} + x_i + x_k \leq 1, \\ -x_{ij} + x_i + x_j \leq 1, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k,$$

из которых следует справедливость линейных неравенств

$$-x_{ij} + x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) = e \in E. \quad (5.87)$$

Учитывая, что из ограничений (5.75) имеем $x_{ij} = 0$ для любого $(i, j) = e \in E$, неравенства (5.87) гарантируют справедливость линейных неравенств (5.86).

ЛП-задача (5.74)–(5.77) эквивалентна такой ЛП-задаче:

$$\alpha_{\nabla}^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.88)$$

при ограничениях

$$x_{ij} = 0 \quad \forall (i, j) = e \in E, \quad (5.89)$$

$$\begin{cases} -x_{ij} - x_{ik} - x_{jk} + x_i + x_j + x_k \leq 1, \\ +x_{ij} + x_{ik} - x_{jk} - x_i \leq 0, \\ +x_{ij} - x_{ik} + x_{jk} - x_j \leq 0, \\ -x_{ij} + x_{ik} + x_{jk} - x_k \leq 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k \in V : i < j < k, \quad (5.90)$$

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad i \in V, \quad (5.91)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) = e \in E, \quad (5.92)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in V, \quad (5.93)$$

Здесь ограничения (5.92) тождественно равны неравенствам (5.86), а ограничения (5.93) следуют из леммы 5.3.

От ЛП-задачи (5.88)–(5.93) легко перейти к ”ослабленной” ЛП-задаче, убрав из нее ограничения (5.89), (5.90) и оставив ограничения (5.91), (5.92) и (5.93).

В результате получаем ЛП-задачу

$$\alpha^*(G, w) = \max \sum_{i \in V} w_i x_i \quad (5.94)$$

при ограничениях

$$0 \leq x_i \leq 1 \quad \forall i \in V, \quad (5.95)$$

$$x_i + x_j \leq 1 \quad \forall (i, j) = e \in E, \quad (5.96)$$

$$\sum_{i \in V(C_{2k+1})} x_i \leq k \quad \forall C_{2k+1} \in V, \quad (5.97)$$

для которой $\alpha^*(G, w) \geq \alpha_{\nabla}^*(G, w)$. ЛП-задача (5.94)–(5.97) является ни чем иным, как формулировкой задачи (5.37) для нахождения $\alpha_C^*(G)$, так как ограничения (5.95)–(5.97) есть определением многогранника $CSTAB(G)$. Следовательно, $\alpha^*(G, w) = \alpha_C^*(G, w)$. Отсюда имеем $\alpha^*(G, w) \geq \alpha_{\nabla}^*(G, w)$. Теорема доказана. \square .

Из теоремы 5.5 и соотношения (5.38) для t -совершенных графов следует справедливость такой теоремы.

Теорема 5.6 *Если граф G – t -совершенный, то*

$$\alpha_{\nabla}^*(G, w) = \alpha(G, w).$$

Следовательно, ЛП-оценка $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$ является точной оценкой сверху для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов.

5.5 Основные результаты раздела 5

В разделе описаны ряд оценок сверху для взвешенного числа устойчивости неориентированного графа. Кратко основные научные результаты раздела

можно сформулировать следующим образом.

1. Для аппроксимации многогранника устойчивых множеств найдены новые семейства линейных неравенств, которые следуют из улучшенной оценки Шора для взвешенного числа устойчивости графа. Они определяют новые семейства графов, для которых взвешенное число устойчивости графа может быть найдено за полиномиальное время. Исследовано семейство W_p -совершенных графов, из которого, как частные случаи, следуют такие известные специальные семейства графов, как совершенные, t -совершенные, h -совершенные, и W -совершенные графы.
2. Предложены верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа, которые базируются на аппроксимации многогранника устойчивых множеств с помощью линейных неравенств для нечетных циклов и p -колес в графе. Построены алгоритмы нахождения верхних оценок на основе решения задачи линейного программирования с конечным числом неравенств, которые получены на основе алгоритма кратчайших путей в специальном графе. Приведены результаты тестовых экспериментов, когда граф содержит от нескольких сотен до тысячи вершин.
3. Для взвешенного числа устойчивости графа построены две верхние ЛП-оценки $\alpha_{\Delta}^*(G, w)$ и $\alpha_{\nabla}^*(G, w)$, которые равны оптимальному значению целевой функции в задачах линейного программирования с числом ограничений $O(|V|^3)$, где V – количество вершин в графе G . Доказано, что они являются не менее точными оценками сверху для взвешенного числа устойчивости произвольного графа, чем известная верхняя оценка, связанная с многогранником нечетных циклов. Обе оценки являются точными для взвешенного числа устойчивости t -совершенного графа.

Результаты опубликованы в четырех¹ статьях в фаховых изданиях и докладывались на семи² конференциях различного уровня.

¹[88] Стецюк П.И., Бутенко С.И., Березовский О.А. Об одной верхней оценке для взвешенного числа устойчивости графа // Теория оптимальных решений, 2007, № 6. – С. 80–89. [91] Стецюк П.И., Бутенко С.И., Лиховид А.П. ЛП-ориентированная верхняя оценка для числа устойчивости графа на основе p -колес // Теория оптимальных решений, 2008, №7. – С. 34–44. [95] Стецюк П.И., Лиховид А.П. Об ЛП-ориентированных верхних оценках для взвешенного числа устойчивости графа // Кибернетика и системный анализ, 2009, №1. – С. 157–170. [98] Стецюк П.И., Ляшко В.И., Нурминский Е.А. Точная ЛП-оценка для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов // Журнал обчислювальної та прикладної математики, №3(99), 2009. – С. 106–115.

²[201]Shor N., Stetsyuk P. Quadratic-type models and upper bounds for the problems of finding the maximum weighted independent set in graphs // Conference on Systems Analysis, Data Mining and Optimization in Biomedicine, February 2–4, 2005, University of Florida, Gainesville, FL. [89] Стецюк П.И., Чумаков Б.М. О свойствах одной верхней оценки Н.З.Шора для взвешенного числа устойчивости графа // конференція "Оптимізація обчислень", (21–27 вересня 2007 р., с. Кацивелі, Крим). [90] Стецюк П.И. О новых свойствах оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа // Праці міжнародної конференції "50 років Інституту кібернетики ім.В.М.Глушкова НАН України", К: Інститут кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2008. – С. 164–173. [92] Стецюк П.И. Оценка Шора для взвешенного числа устойчивости W_p -совершенных графов // Материалы международной научной конференции "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии", 19–21 марта 2008, Кишинэу, Академия транспорта, информатики и коммуникаций. – С. 112–121. [187] Лукнов О., Стетсук Р. On numerical experiments with two LP-oriented upper bounds for the stability number of a graph // Abstracts of International Conference "Discrete and Global Optimization"(July 31 - August 2, 2008, Yalta, Ukraine). [205] Stetsyuk P. On interesting properties of Shor's upper bounds for weighted stability number of a graph // Abstracts of International Conference "Discrete and Global Optimization"(July 31 – August 2, 2008, Yalta, Ukraine). [103] Стецюк П.И. Оценки Н.З. Шора в квадратичных экстремальных задачах и их применение в комбинаторной оптимизации // Российская конференция "Дискретная оптимизация и исследование операций": Материалы конференции (Алтай, 27 июня – 3 июля 2010). – Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2010. – С. 60–64.

Раздел 6

Три квадратичные экстремальные задачи

В разделе рассмотрены специальные квадратичные экстремальные задачи и методы их решения на основе техники лагранжевых двойственных оценок.

В подразделе 6.1 рассмотрена задача нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения вершин графа, для нее исследован алгоритм получения лагранжевой двойственной оценки [84]. В подразделе 6.2 рассматривается задача глобальной оптимизации, связанная с нахождением минимума специального вида квадратичной однородной функции на многообразии Штифеля (наборе k ортонормированных векторов в E^n , $k \leq n$). Исследованы квадратичные оптимизационные модели для трех вариантов этой задачи, которые различаются ограничениями на компоненты ортонормированных векторов. Рассмотрены двойственные оценки для каждой из задач и на тестовых примерах показано, что их можно эффективно использовать при нахождении глобального минимума [145, 146].

В подразделе 6.3 рассматривается задача нелинейного программирования с билинейной целевой функцией, линейными и квадратичными ограничениями, которая описывает связь между конечным выпуском и добавленной стоимостью в статических моделях Леонтьева. Если матрица Леонтьева (матрица коэффициентов прямых затрат) продуктивна, то оптимальное решение задачи выражается через собственные векторы, соответствующие максимальным собственным числам некоторых неотрицательных симметричных матриц. Если матрица Леонтьева продуктивна и неразложима, то задача имеет единственное решение, которое интерпретируется как оптимальные нормированные структуры конечного выпуска и добавленной стоимости для экономики по Леонтьеву. Приведены расчеты для 15-отраслевых матриц Леонтьева, которые построены на основе таблиц 38-отраслевого баланса Украины за 2003-2009 годы [101, 108].

6.1 Задача о бисекции графа

Рассмотрен алгоритм получения двойственной оценки сверху для максимального по весу разреза неориентированного графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения вершин графа.

В подразделе рассматривается задача нахождения максимального по весу разреза графа $G(V, E)$ с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения. Вес ребра $(i, j) \in E$ задан неотрицательным числом w_{ij} . Не ограничивая общности, будем считать, что количество вершин в подмножестве V_1 равно k , а в подмножестве V_2 равно $n - k$, где $k < n$. Задача нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения состоит в нахождении разбиения множества вершин V на два таких подмножества V_1^* и V_2^* ($|V_1^*| = k$), чтобы этому разбиению соответствовал максимальный по весу разрез $mc(G, w, k)$.

В случае, когда $k = 1, 2, 3$, задача определения $mc(G, w, k)$ является достаточно простой. Даже чисто переборные алгоритмы для нее будут иметь сложность $O(|E|)$, $O(|E|^2)$, $O(|E|^3)$ соответственно. Однако, по мере увеличения k сложность задачи возрастает, и при больших $k \leq \frac{n}{2}$ задача становится NP -трудной. Так, например, когда $k = \frac{n}{2}$, а n — четное, то эта задача является NP -трудной задачей нахождения оптимальной бисекции графа ([11], с.113). В силу этого вопросы, связанные с уточнением верхних оценок для $mc(G, w, k)$ представляют большой интерес.

Ниже обсуждается верхняя лагранжева оценка Ψ^* для оптимизационной квадратичной задачи, эквивалентной исходной задаче определения $mc(G, w, k)$. С помощью точных штрафных функций показано, что нахождение Ψ^* сводится к решению безусловной задачи минимизации выпуклой функции. Приведены результаты численных экспериментов.

Формулировка задачи. Пусть вершине $i \in V$ ($i \in \{1, 2, \dots, n\}$) соответ-

ствуется бинарная переменная $x_i \in \{-1, 1\}$, такая что

$$x_i = \begin{cases} -1, & \text{если } i \in V_1, \\ +1, & \text{если } i \in V_2. \end{cases}$$

Задаче нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения соответствует следующая квадратичная экстремальная задача:

$$mc(G, w, k) = \max_{x \in E^n} \left\{ Q(x) = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i - x_j)^2 \right\} \quad (6.1)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 = 1, \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (6.2)$$

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = (n - 2k)^2. \quad (6.3)$$

Здесь квадратичная функция $Q(x)$ в целевой функции (6.1) задает вес разреза графа для произвольного разбиения вершин V на подмножества V_1 и V_2 . Действительно, функцию $Q(x)$ можно записать в такой форме

$$Q(x) = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i - x_j)^2 = \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2 = \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} y_{ij}, \quad (6.4)$$

где

$$y_{ij} = \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2.$$

Принимая в расчет, что $x_i^2 = 1$ и $x_j^2 = 1$, имеем

$$y_{ij} = \frac{(x_i - x_j)^2}{4} = \frac{x_i^2 - 2x_i x_j + x_j^2}{2} = \frac{2 - 2x_i x_j}{4} = \frac{1 - x_i x_j}{2}.$$

Отсюда следует, что

$$y_{ij} = \frac{1 - x_i x_j}{2} = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i = 1 \text{ и } x_j = -1, \\ 1, & \text{если } x_i = -1 \text{ и } x_j = 1, \\ 0, & \text{если } x_i = 1 \text{ и } x_j = 1, \\ 0, & \text{если } x_i = -1 \text{ и } x_j = -1, \end{cases}$$

и суммироваться в функции $Q(x)$ будут веса только тех ребер, вершины которых лежат в разных подмножествах V_1 и V_2 .

Итак, целевая функция (6.1) означает максимизацию веса разреза графа для произвольного разбиения вершин V на подмножества V_1 и V_2 . Ограничения (6.2)–(6.3) задают требование, чтобы одно из подмножеств содержало k вершин из V , а второе – оставшиеся $n - k$ вершин. Ограничения (6.2) отражают бинарность переменных x_i , $i = 1, \dots, n$, и означают, что x_i принадлежит либо подмножеству V_1 ($x_i = -1$), либо подмножеству V_2 ($x_i = 1$). Ограничение (6.3) задает условие, что разность между количеством вершин в двух подмножествах V_1 и V_2 может быть равной либо $k - (n - k) = 2k - n$, либо $(n - k) - k = n - 2k$, т.е.

$$\sum_{i=1}^n x_i = \pm (n - 2k). \quad (6.5)$$

Квадратичное ограничение (6.3) – это возведенное в квадрат равенство (6.5). В случае оптимальной бисекции графа равенство (6.5) и его квадратичный аналог (6.3) упрощаются и переходят соответственно в ограничения

$$\sum_{i=1}^n x_i = 0 \quad \text{и} \quad \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = 0.$$

Задача (6.1)–(6.3) является невыпуклой многоэкстремальной задачей нелинейного программирования, где целевая функция (6.1) и ограничения (6.2) и (6.3) – квадратичные функции. Для того, чтобы оценить сверху значение глобального максимума $mc(G, w, k)$, целесообразно применить методику лагранжевых двойственных оценок для квадратичных экстремальных задач [136, 198]. Пусть Ψ^* – наилучшая оценка из класса лагранжевых двойственных оценок для задачи (6.1)–(6.3). Для нее справедливо $\Psi^* \geq mc(G, w, k)$, а точность оценки Ψ^* (т.е. близость ее к $mc(G, w, k)$) зависит от структуры графа G и от весов его ребер.

Специфика задачи (6.1)–(6.3) состоит в том, что целевая функция (6.1) и ограничения (6.2) и (6.3) являются квадратичными функциями не содержащими линейных членов от переменных x_i , $i = 1, \dots, n$. Ниже такие функции будут называться однородными. Свойство однородности квадратичных функций в задаче (6.1)–(6.3) позволяет избежать решения задачи миними-

зации выпуклой функции, которая определена на классе неположительно определенных матриц. Нахождение оценки Ψ^* для задачи (6.1)–(6.3) можно свести к безусловной задаче минимизации выпуклой функции, т.е. условие на неположительно определенность семейства симметричных матриц можно учесть автоматически. Так, например, этот факт был использован в [138] для задачи о максимальном разрезе графа.

Теорема Пшеничного о точных штрафных функциях. Пусть имеется следующая задача оптимизации: найти

$$\min_{y \in M} f_0(y) \quad (6.6)$$

при ограничениях

$$f_i(y) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad (6.7)$$

где $f_i(y)$, $i = 0, 1, \dots, m$, – непрерывные функции, $M \subset E^n$ – некоторое множество.

Пусть для учета ограничений (6.7) используется негладкая штрафная функция в форме функции максимума:

$$\begin{aligned} \Phi_N(y) &= f_0(y) + N \times F(y), \\ F(y) &= \max\{0, f_1(y), \dots, f_m(y)\}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

В монографии Б.Н. Пшеничного [51] приведена теорема, которая для специального вида задач (6.6)–(6.7) дает возможность устанавливать точное значение штрафного множителя N таким, чтобы решение безусловной задачи минимизации функции (6.8) совпадало с решением задачи (6.6)–(6.7).

Этот результат состоит в следующем. Рассмотрим семейство параметрических задач

$$V(z) = \inf \{f_0(y) : f_i(y) \leq z_i; i = 1, \dots, m; y \in M\},$$

зависящее от вектора $z \in E^m$. Очевидно, что

$$V(0) = \inf \{f_0(y) : f_i(y) \leq 0; i = 1, \dots, m; y \in M\}$$

совпадает с решением задачи (6.6)–(6.7). Справедлива следующая теорема.

Теорема 6.1 ([51], теорема 2.14) Пусть $\inf_{\lambda>0} \frac{V(\lambda e) - V(0)}{\lambda} = -L > -\infty$, где e – m -мерный вектор, все компоненты которого равны единице. Если $N > L$, то тогда точки минимума задач $V(0)$ и $\inf_{y \in M} \Phi_N(y)$, где $\Phi_N(y)$ определяется по формуле (6.8), совпадают.

Теорема 6.1 дает инструмент для установления точного значения штрафного множителя при использовании для решения задачи (6.6)-(6.7) негладкой штрафной функции в форме функции максимума. Ниже она будет использована при обосновании алгоритма нахождения оценки Ψ^* . Кроме того, эта теорема будет использоваться в подразделах 6.2 и 7.4.

Нахождение верхней оценки Ψ^* . Основной результат для нахождения верхней оценки Ψ^* сформулируем в форме следующей теоремы.

Теорема 6.2 Пусть $u \in E^{n+1}$ и $K(u)$ – симметричная матрица размера $n \times n$, элементы которой $K_{ij}(u)$ для $\forall i, j = 1, \dots, n$ линейно зависят от компонент вектора u и определяются по правилу

$$K_{ij}(u) = K_{ji}(u) = \begin{cases} -u_i - u_{n+1}, & \text{если } i = j, \\ -u_{n+1} - w_{ij}, & \text{если } (i, j) \in E, \\ -u_{n+1}, & \text{если } (i, j) \notin E. \end{cases}$$

Пусть $\lambda_{\max}(A)$ – максимальное собственное число симметричной матрицы A .

Тогда глобальному максимуму $tc(G, w, k)$ в задаче (6.1)-(6.3) соответствует верхняя оценка

$$\Psi^* = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} \psi^*, \quad (6.9)$$

где ψ^* – решение безусловной задачи минимизации выпуклой функции

$$\psi^* = \min_u \left(\sum_{i=1}^n u_i + (n - 2k)^2 u_{n+1} + S \max\{0, \lambda_{\max}((u))\} \right) \quad (6.10)$$

при $S > n$.

Доказательство. Доказательство теоремы проведем в два этапа. На первом этапе покажем справедливость (6.9), предполагая, что ψ^* – лагранжева

оценка для некоторой новой задачи квадратичного типа. На втором этапе покажем, что ψ^* вычисляется согласно (6.10), где нижняя граница на негладкий штраф S , равная n , устанавливается с помощью теоремы 6.1.

Первый этап. Учитывая (6.4), функцию $Q(x)$ можно записать в таком виде:

$$Q(x) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} - \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} x_i x_j = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in E} -2w_{ij} x_i x_j.$$

Следовательно, задача (6.1)–(6.3) эквивалентна задаче

$$mc(G, w, k) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} q^*, \quad (6.11)$$

где q^* – решение такой задачи квадратичного типа

$$q^* = \max_{x \in E^n} \sum_{(i,j) \in E} -2w_{ij} x_i x_j \quad (6.12)$$

при ограничениях:

$$x_i^2 = 1, \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (6.13)$$

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 = (n - 2k)^2. \quad (6.14)$$

Пусть ψ^* – верхняя лагранжева оценка для задачи (6.12)–(6.14). Тогда из (6.11) имеем

$$mc(G, w, k) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} q^* \leq \Psi^* = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} \psi^*,$$

что означает справедливость равенства (6.9) при условии, что ψ^* – верхняя лагранжева оценка, соответствующая задаче (6.12)–(6.14).

Второй этап. Сначала, согласно технике Н.З.Шора [198], будет найдена оценка ψ^* для задачи (6.12)–(6.14), а затем будет доказано, что ψ^* вычисляется согласно (6.10).

Пусть $u \in E^{n+1}$ – вектор множителей Лагранжа, соответствующий ограни-

чениям (6.13)–(6.14). Запишем для задачи (6.12)–(6.14) функцию Лагранжа

$$\begin{aligned} L(x, u) &= \sum_{(i,j) \in E} -2w_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^n u_i(1 - x_i^2) + u_{n+1} \left((n - 2k)^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right) = \\ &= x^T K(u)x + \sum_{i=1}^n u_i + u_{n+1} (n - 2k)^2. \end{aligned}$$

Рассмотрим функцию $\psi(u) = \max_{x \in E^n} L(x, u)$. Она имеет следующую форму

$$\psi(u) = \begin{cases} +\infty, & \text{если } \lambda_{\max}(K(u)) > 0, \\ \sum_{i=1}^n u_i + u_{n+1} (n - 2k)^2, & \text{если } \lambda_{\max}(K(u)) \leq 0, \end{cases}$$

где $\lambda_{\max}(K(u))$ – максимальное собственное число матрицы $K(u)$. Наилучшей двойственной Лагранжевой оценкой является $\psi^* = \min_{u \in E^{n+1}} \psi(u)$; она определяется решением следующей задачи:

$$\psi^* = \min_u \left(\sum_{i=1}^n u_i + u_{n+1} (n - 2k)^2 \right) \quad (6.15)$$

при ограничении

$$\lambda_{\max}(K(u)) \leq 0. \quad (6.16)$$

Заменим задачу (6.15)–(6.16) задачей безусловной оптимизации, используя для учета ограничения (6.16) негладкую штрафную функцию в форме функции максимума:

$$\psi(S) = \min_{u \in E^n} \left(\sum_{i=1}^n u_i + (n - 2k)^2 u_{n+1} + S \cdot \max\{0, \lambda_{\max}(K(u))\} \right), \quad (6.17)$$

где S – штрафной множитель ($S > 0$).

Покажем, что если штрафной множитель S установить больше чем n , то решения задачи (6.17) и задачи (6.15)–(6.16) совпадают. Семейство парамет-

рических задач для задачи (6.15)–(6.16) имеет вид

$$\begin{aligned}
V(t) &= \inf \left\{ \sum_{i=1}^n u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} : \lambda_{\max}((u)) \leq t \right\} = \\
&= \inf \left\{ \sum_{i=1}^n u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} : \lambda_{\max}((u) - tI) \leq 0 \right\} = \\
&= \inf \left\{ \sum_{i=1}^n (u_i + t) + (n-2k)^2 u_{n+1} - nt : \lambda_{\max}((u) - tI) \leq 0 \right\} = \\
&= \inf \left\{ \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i + (n-2k)^2 \tilde{u}_{n+1} - nt : \lambda_{\max}((\tilde{u})) \leq 0 \right\} = \\
&= V(0) - nt,
\end{aligned}$$

где $\tilde{u}_i = u_i + t$, а $\tilde{u}_{n+1} = u_{n+1}$. Тогда

$$\inf_{t>0} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \inf_{t>0} \frac{V(0) - nt - V(0)}{t} = -n = -L > -\infty.$$

и согласно теореме 6.1 при $S > L = n$

$$\psi(S) = \min_{u \in E^n} \left(\sum_{i=1}^n u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} + S \max\{0, \lambda_{\max}((u))\} \right) = \psi^*.$$

Теорема доказана. \square

Программа StVe06 и тестовые эксперименты. Для задачи о максимальном разрезе графа в [173, 171] предложен способ генерации допустимых решений с использованием собственных векторов, связанных с $\lambda_n(W(\bar{u}))$, где W – симметричная $(n \times n)$ -матрица с диагональными компонентами $\bar{u} = u^*$. Пусть $s(\bar{u}) = \{s_i(\bar{u})\}_{i=1}^n$ – собственный вектор, связанный с $\lambda_n(W(\bar{u}))$. Запишем его элементы в невозрастающем порядке:

$$s_{i_1}(\bar{u}) \geq s_{i_2}(\bar{u}) \geq \dots \geq s_{i_n}(\bar{u}).$$

Для различных k , $1 \leq k \leq n$, построим разрез V :

$$V = S(k) \cup (V \setminus S(k)),$$

где $S(k) = \{i_1, \dots, i_k\}$, и найдем $\max_k c(S(k)) = c(S(\bar{k}))$, где $c(S(k))$ – значение разреза, соответствующего двум подмножествам: $S(k)$ и $V \setminus S(k)$. Выберем допустимый вектор $y(s(\bar{u}))$, соответствующий этому разрезу:

$$y(s(\bar{u})) = \begin{cases} 1, & \text{for } i \in S(\bar{k}), \\ -1, & \text{for } i \in V \setminus S(\bar{k}). \end{cases}$$

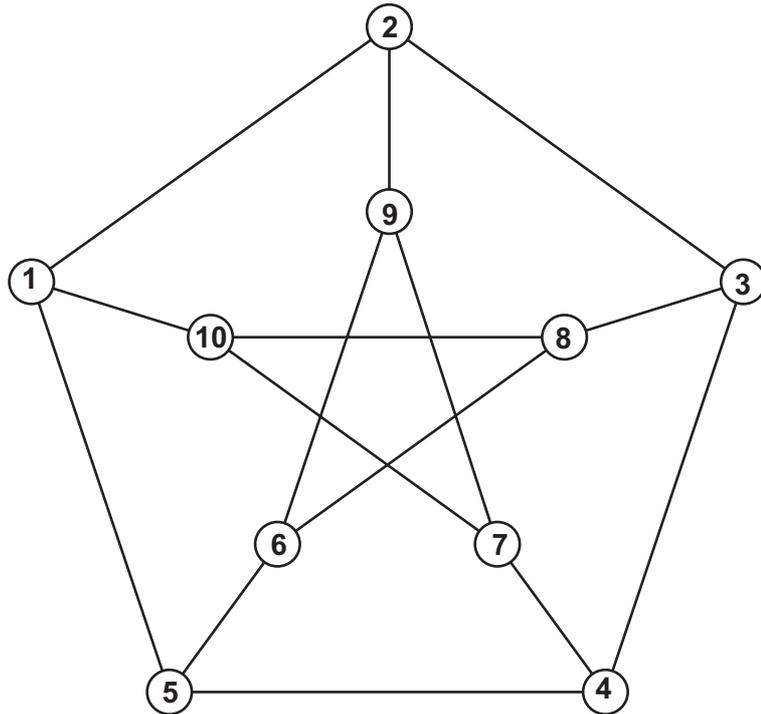


Рис. 6.1. Граф Петерсена. Имеет 10 вершин и 15 ребер. Его можно построить, взяв дополнение реберного графа для полного 5-графа.

Во многих случаях $y(s(\bar{u}))$ достаточно хорошо приближает оптимальное решение.

Этот способ легко адаптируется для нахождения допустимых решений задачи (6.1)-(6.3), если использовать компоненты максимального собственного вектора матрицы $K(u)$, построенной согласно теореме 6.2. На основе теоремы 6.2 и адаптированного способа нахождения допустимых решений для $mc(G, w, k)$ разработана и протестирована программа StBe06. В ней в качестве нижней оценки для $mc(G, w, k)$ используется рекордное значение целевой функции для сгенерированных допустимых решений.

Программа StBe06 предназначена для решения задачи нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданным количеством переменных в обоих подмножествах разбиения (частный случай – классическая задача бисекции графа). Программа использует $r(\alpha)$ -алгоритм с адаптивной регуляризацией шага для решения задачи (6.10) – задачи безусловной минимизации негладкой выпуклой функции.

Приведем численные результаты для тестовых задач для графа Петерсе-

Таблица 6.1. Веса ребер графа Петерсена для тестовых примеров P_1, \dots, P_9

(i, j)	w_{ij}								
	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6	P_7	P_8	P_9
(1,2)	1	5	2	5	1	5	2	5	1
(1,5)	1	1	3	6	8	2	7	2	3
(1,10)	1	3	4	3	1	2	2	2	3
(2,3)	1	2	7	2	3	1	3	6	8
(2,9)	1	2	6	2	5	5	1	5	9
(3,4)	1	3	1	6	7	3	4	3	1
(3,8)	1	4	3	4	2	1	2	1	2
(4,5)	1	1	2	1	2	2	6	2	5
(4,7)	1	1	5	1	3	4	3	4	2
(5,6)	1	5	1	5	9	3	1	6	7
(6,8)	1	5	5	5	4	1	5	1	3
(6,9)	1	3	1	3	1	5	5	5	4
(7,9)	1	2	2	2	3	3	1	3	1
(7,10)	1	1	2	1	8	1	2	1	8
(8,10)	1	1	1	1	1	1	1	1	1

на (10 вершин и 15 ребер) с нумерацией вершин, соответствующей работе [138]. Граф Петерсена приведен на рис. 6.1, значения весов его ребер для девяти примеров P_1, \dots, P_9 приведены в табл. 6.1. Результаты экспериментов для ряда возможных разбиений множества вершин графа Петерсена даны в табл. 6.2. Здесь ψ_{up} – найденная верхняя оценка, ψ_{lo} – значение разреза, полученное путем применения эвристической процедуры для нахождения „хорошего“ допустимого разреза. Этот разрез представлен в табл. 6.2 с помощью V_1 (меньшее из подмножеств).

Из таблицы видно, что в значительном количестве случаев разрыв между найденными верхней и нижней оценками меньше единицы. Это означает, что полученное с помощью эвристической процедуры допустимое решение является одним из оптимальных разбиений графа. Если это не так, то для улучшения верхних оценок можно использовать функционально избыточные ограничения, которые применялись выше для максимального разреза гра-

Таблица 6.2. Верхние и нижние оценки для взвешенного разреза графа Петерсена при трех различных способах разбиения множества вершин

<i>Test</i>	$V(3) : V(7)$			$V(4) : V(6)$			$V(5) : V(5)$		
	ψ_{up}	ψ_{lo}	V_1	ψ_{up}	ψ_{lo}	V_1	ψ_{up}	ψ_{lo}	V_1
P_1	10.500	9.0	2,4,6	12.500	12.0	3,5,9,10	12.500	11.0	1,2,4,6,8
P_2	31.946	31.0	1,3,6	35.918	35.0	1,3,6,7	34.986	34.0	2,3,6,7,10
P_3	35.516	33.0	2,7,8	39.993	39.0	2,5,7,8	40.833	40.0	1,3,4,6,9
P_4	39.953	39.0	1,3,6	43.921	43.0	1,3,6,7	41.627	40.0	2,4,5,8,10
P_5	46.406	45.0	3,5,7	51.871	50.0	1,3,6,7	52.527	51.0	3,5,7,8,9
P_6	31.952	31.0	1,4,9	34.938	34.0	1,4,8,9	34.139	33.0	2,3,6,7,10
P_7	35.997	35.0	1,4,6	39.971	39.0	1,4,8,9	40.133	39.0	1,2,4,8,9
P_8	37.830	37.0	2,4,6	41.518	41.0	2,4,6,10	40.976	40.0	2,4,6,8,10
P_9	47.666	45.0	2,5,10	52.880	52.0	3,5,9,10	52.988	52.0	3,5,8,9,10

фа. Например, если для задачи об оптимальной бисекции графа Петерсена с весами ребер P_7 использовать функционально избыточные неравенства

$$-x_1x_3 - x_1x_9 + x_3x_9 \geq -1 \quad \text{и} \quad x_1x_3 + x_1x_{10} + x_3x_{10} \geq -1,$$

то получим верхнюю оценку, равную 39.973, вместо 40.133. Данное улучшение существенно, поскольку разрыв между верхней и нижней оценками становится меньше единицы.

6.2 Специальная квадратичная задача на многообразии Штифеля

В подразделе рассматривается задача глобальной оптимизации, связанная с нахождением минимума специального вида квадратичной однородной функции на многообразии Штифеля (наборе k ортонормированных векторов в E^n , $k \leq n$). Описаны квадратичные экстремальные задачи для трех вариантов этой задачи, которые различаются ограничениями на компоненты ортонормированных векторов. Рассмотрены двойственные нижние оценки для каждой из задач и на тестовых примерах показано, что их можно эффективно использовать при нахождении глобального минимума.

Многообразие Штифеля $M_{n,k}$ и постановка задачи. Многообразие

Штифеля (Stiefel manifold) состоит из всех ортонормированных систем векторов $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_k \in E^n$, где E^n – n -мерное евклидово пространство и $k \leq n$. В работах [194, 156] рассмотрена следующая квадратичная оптимизационная задача на многообразии Штифеля:

$$\min \left\{ f(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k) = \sum_{i=1}^k \vec{x}_i^T A_i \vec{x}_i \right\} \quad (6.18)$$

при ограничениях

$$\vec{x}_i^T \vec{x}_j = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq k, \quad (6.19)$$

где A_i , $i=1, \dots, k$ – заданные вещественные симметричные матрицы размера $n \times n$, δ_{ij} – символ Кронекера. Ограничения (6.19) задают многообразие Штифеля, которое принято обозначать $M_{n,k}$.

В зависимости от условий, наложенных на неизвестные компоненты векторов из $M_{n,k}$, можно выделить следующие варианты задачи (6.18)–(6.19):

- (R) компоненты векторов \vec{x}_i , $i=1, \dots, k$ принадлежат множеству действительных чисел. Этот вариант совпадает с приведенной выше постановкой задачи (6.18)–(6.19);
- (Z) компоненты векторов \vec{x}_i , $i=1, \dots, k$ принадлежат множеству целых чисел. Для этого варианта векторы \vec{x}_i , $i=1, \dots, k$ могут содержать только компоненты либо 0, либо +1, либо –1. В силу ортонормированности каждый из векторов \vec{x}_i должен содержать только одну компоненту равную ± 1 ;
- (N) компоненты векторов \vec{x}_i , $i=1, \dots, k$ принадлежат множеству натуральных чисел, т.е. векторы \vec{x}_i , $i=1, \dots, k$ могут содержать только компоненты либо 0, либо 1. Аналогично, как и для варианта (Z), вектор \vec{x}_i должен содержать ровно одну компоненту, равную единице.

Особенности задачи (6.18)–(6.19) связаны со спецификой целевой функции (6.18), а именно с тем, что функция $f(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$ не содержит членов вида $\vec{x}_i^T A_j \vec{x}_j$ для $i \neq j$. Так, варианты (Z) и (N) определяются только диагональными коэффициентами матриц A_i и не зависят от коэффициентов вне

диагонали. В силу этого они близки в том смысле, что им соответствует одно и то же значение целевой функции в точках глобальных экстремумов. Отличие состоит лишь в количестве глобальных экстремумов, т.е. если у варианта (N) их количество равно L , то у варианта (Z) их будет $2^k \cdot L$. Благодаря специфике целевой функции, вариант (N) при $k = n$ тождественно равносильно хорошо известной задаче о назначениях:

$$\min \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij} x_{ij} \quad (6.20)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^n x_{ij} = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad (6.21)$$

$$\sum_{i=1}^n x_{ij} = 1, \quad j = 1, \dots, n, \quad (6.22)$$

$$x_{ij} = 0 \vee 1, \quad i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, n, \quad (6.23)$$

для решения которой существуют полиномиальные алгоритмы [43]. Указанное соответствие очевидно. Так, например, задаче (6.18)–(6.19) при $k = n$ и $\vec{x}_i \in N^n$ можно поставить в соответствие задачу (6.20)–(6.23), для которой в качестве коэффициентов c_{kj} , $j = 1, \dots, n$ выбраны диагональные коэффициенты матрицы A_k , $k = 1, \dots, n$. Несложно провести и обратное сведение: достаточно в задаче (6.18)–(6.19) для каждого k ($k = 1, \dots, n$) взять диагональные матрицы A_k тождественно равными коэффициентам c_{kj} , $j = 1, \dots, n$.

В общем случае задача (6.18)–(6.19) для каждого из трех вариантов является многоэкстремальной задачей нелинейного программирования, и ее решение представляет проблемы даже при небольших размерностях $n = 2$ и $n = 3$. Так, например, в [155] сообщается, что простой пример на $M_{2,2}$ с диагональными коэффициентами матриц A_i , $i = 1, 2$ требует трех миллионов вычислений значений функции при использовании программы GlobSol [167, 179]. В статье [156] время решения задачи на $M_{3,3}$ оценивается в три-четыре дня работы среднего компьютера на достаточно несложных тестовых примерах.

Используя технику лагранжевых двойственных оценок, нахождение глобального минимума в задаче (6.18)–(6.19) в ряде случаев можно значительно ускорить. На тестовых примерах будет показано, что, используя алгоритмы нахождения двойственных оценок, в ряде случаев для задачи (6.18)–(6.19) можно находить как точное значение функции в точке глобального минимума, так и саму эту точку. Специфика задачи (6.18)–(6.19) дает возможность для варианта (N) доказать, что построенные нижние оценки являются точными для значения функции в точке глобального минимума.

Рассмотренные ниже квадратичные экстремальные задачи легко перенести на общий случай квадратичной функции цели. При этом изменяется только целевая функция, а системы квадратичных ограничений в задачах остаются теми же. Нижние двойственные оценки можно будет использовать, например, в квадратичной задаче о назначениях, в которой рассматривается квадратичная функция следующего вида:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{t=1}^n \sum_{r=1}^n a_{ij} x_{it} x_{jr} b_{tr}.$$

А эта задача уже является NP -трудной (см., например, [193]) и построение эффективных нижних оценок для нее представляет как теоретический, так и практический интерес.

Нижние двойственные оценки для $k < n$. Рассмотрим квадратичные экстремальные задачи, соответствующие каждому из указанных трех вариантов, и лагранжевы двойственные оценки для каждой из задач.

Для каждого $i = \overline{1, k}$ обозначим коэффициенты симметричной матрицы A_i размера $n \times n$ через a_{ijl} , $j = \overline{1, n}$, $l = \overline{1, n}$, а компоненты n -мерного вектора \vec{x}_i через x_{ij} , $j = \overline{1, n}$.

Варианту (R) соответствует квадратичная экстремальная задача:

$$Q_1^* = \min \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ijl} x_{ij} x_{il} \quad (6.24)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^n x_{ij}^2 = 1, \quad i = \overline{1, k} \quad (6.25)$$

$$\sum_{l=1}^n x_{il} x_{jl} = 0, \quad i = \overline{1, k-1}, \quad j = \overline{i+1, k}. \quad (6.26)$$

Задача (6.24)–(6.26) является записанным с учетом расшифровки символа Кронекера δ_{ij} аналогом задачи (6.18)–(6.19). Здесь ограничения (6.25) задают условие нормированности векторов \vec{x}_i , $i = \overline{1, k}$, а ограничения (6.26) – условие их взаимной ортогональности. Указанных ограничений достаточно для задания многообразия Штифеля $M_{n,k}$, состоящего из всех ортонормированных систем векторов $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_k \in E^n$ ($k \leq n$).

Пусть $u \in E^m$, где $m = k(k+1)/2$ – вектор множителей Лагранжа, состоящий из двух частей: $\{u_{ii}, i = \overline{1, k}\}$ – множители Лагранжа, соответствующие ограничениям (6.25) и $\{u_{ij}, i = \overline{1, k-1}, j = \overline{i+1, k}\}$ – множители Лагранжа, соответствующие ограничениям (6.26). Согласно [198], задаче (6.24)–(6.26) соответствует следующая нижняя двойственная оценка:

$$\psi_1^* = \psi_1(u^*) = \sup_{u: K(u) \geq 0} \psi_1(u), \quad (6.27)$$

где функция $\psi_1(u) = -\sum_{i=1}^k u_{ii}$, а $K(u) \geq 0$ обозначает неотрицательную определенность семейства симметричных $kn \times kn$ -матриц вида:

$$K(u) = K_0 + \sum_{i=1}^k u_{ii} K_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k u_{ij} (K_{ij} + K_{ji}).$$

Здесь матрицы K_0 и K_{ij} состоят из k^2 блоков размером $n \times n$ и задаются следующим образом. По диагонали матрицы K_0 размещены блоки, заданные симметричными $(n \times n)$ -матрицами A_i , $i = \overline{1, k}$, а все недиагональные блоки матрицы K_0 равны нулевым $n \times n$ -матрицам. K_{ij} – это матрица, (i, j) -й блок которой равен единичной $n \times n$ -матрице, а все остальные блоки равны нулевым $n \times n$ -матрицам.

Варианту (Z) соответствует квадратичная экстремальная задача:

$$Q_2^* = \min \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ijl} x_{ij} x_{il} \quad (6.28)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^n x_{ij}^2 = 1, \quad i = \overline{1, k} \quad (6.29)$$

$$\sum_{l=1}^n x_{il} x_{jl} = 0, \quad i = \overline{1, k-1}, \quad j = \overline{i+1, k}, \quad (6.30)$$

$$x_{ij} x_{il} = 0, \quad i = \overline{1, k}, \quad j = \overline{1, n-1}, \quad l = \overline{j+1, n}, \quad (6.31)$$

$$x_{ij} x_{lj} = 0, \quad j = \overline{1, k}, \quad i = \overline{1, k-1}, \quad l = \overline{i+1, k}. \quad (6.32)$$

Эта постановка получена путем расширения предыдущей задачи (6.24)–(6.26). Тот факт, что компоненты векторов должны принадлежать множеству целых чисел, определяется посредством двух групп дополнительных ограничений. Так, группа ограничений (6.31) обозначает, что для любой пары компонент вектора их произведение должно равняться нулю. Это связано с тем фактом, что для варианта (Z) каждый из векторов содержит только одну ненулевую компоненту, равную $+1$, либо -1 . Последнее следует из условий нормировки векторов \vec{x}_i , $i = \overline{1, k}$, заданных ограничениями (6.29), и того, что компоненты векторов должны принадлежать множеству целых чисел. Ограничения (6.32) означают, что для двух различных векторов компоненты с одним и тем же номером не могут одновременно быть ненулевыми, т. е. ± 1 для разных векторов должны находиться на разных местах. Последнее обусловлено уже не только нормированностью, но и взаимной ортогональностью векторов.

Задача (6.29)–(6.32) с некоторым запасом идентифицирует вариант (Z). Так, ограничения (6.30) можно исключить, поскольку они являются линейной комбинацией ограничений (6.32). Другими словами, для вектора двойственных переменных $u \in E^m$, введенного ранее для ограничений вида (6.29)–(6.30), принимаем $u_{ij} = 0$, $i = \overline{1, k-1}$, $j = \overline{i+1, k}$. Отметим, что было бы также разумно рассмотреть для варианта (Z) задачу только с одной группой

ограничений – либо (6.31), либо (6.32). Однако включение обеих групп ограничений увеличивает количество неизвестных множителей Лагранжа и тем самым способствует уточнению нижних двойственных оценок для Q_2^* .

Задаче (6.28)–(6.29), (6.31)–(6.32) соответствует нижняя двойственная оценка:

$$\psi_2^* = \psi_2(u^*, v^*, V^*) = \sup_{u, v, V : K(u, v, V) \leq 0} \psi_2(u, v, V), \quad (6.33)$$

где $\psi_2(u, v, V) = \psi_1(u) = -\sum_{i=1}^k u_{ii}$.

Здесь

- $u \in E^k$ – часть вектора множителей Лагранжа, соответствующих ограничениям (6.29) и (6.30);
- $v \in E^{m_1}$, $m_1 = k \frac{n(n-1)}{2}$ – вектор множителей Лагранжа, соответствующих ограничениям (6.31);
- $V \in E^{m_2}$, $m_2 = n \frac{k(k-1)}{2}$ – вектор множителей Лагранжа, соответствующих ограничениям (6.32);
- $K(u, v, V) \geq 0$ обозначает неотрицательную определенность семейства симметричных матриц

$$K(u, v, V) = K_0 + \sum_{i=1}^k u_{ii} K_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{l=j+1}^n v_{ijl} (K_{ijl} + K_{ilj}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{l=i+1}^k \sum_{j=1}^n V_{ijl} (\tilde{K}_{ilj} + \tilde{K}_{lij}),$$

- K_{ijl} – матрица размера $nk \times nk$, в i -м диагональном блоке которой содержится $(n \times n)$ -матрица с (j, l) -м коэффициентом, равным единице, и всеми остальными коэффициентами, равными нулю;
- \tilde{K}_{ilj} – матрица размера $nk \times nk$, для которой блок (i, l) содержит $(n \times n)$ -матрицу с j -м диагональным коэффициентом, равным единице, и всеми остальными коэффициентами, равными нулю. Все остальные блоки матрицы \tilde{K}_{ilj} равны нулевым $(n \times n)$ -матрицам.

Функция $\psi_2(u, v, V)$ имеет такой же вид, как и функция ψ_1 для первой задачи. Это обусловлено однородностью добавленных ограничений (6.31)–(6.32) и тем, что правая часть в этих ограничениях тождественно равна нулю.

Далее рассмотрим вариант (N). Ему соответствует квадратичная экстремальная задача:

$$Q_3^* = \min \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ijl} x_{ij} x_{il} \quad (6.34)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^n x_{ij}^2 = 1, \quad i = \overline{1, k}, \quad (6.35)$$

$$x_{ij} x_{il} = 0, \quad i = \overline{1, k}, \quad j = \overline{1, n-1}, \quad l = \overline{j+1, n}, \quad (6.36)$$

$$x_{ij} x_{lj} = 0, \quad j = \overline{1, k}, \quad i = \overline{1, k-1}, \quad l = \overline{i+1, k}. \quad (6.37)$$

$$x_{ij}^2 - x_{ij} = 0, \quad i = \overline{1, k}, \quad j = \overline{1, n}. \quad (6.38)$$

Задача (6.34)–(6.38) получена из задачи (6.28)–(6.32) добавлением булевых ограничений (6.38) на неизвестные компоненты векторов \vec{x}_i , $i = \overline{1, k}$. Здесь отсутствуют ограничения (6.30), которые есть лишними как для варианта (Z), а тем более для варианта (N).

Задача (6.34)–(6.38) существенно отличается от двух предыдущих. В обеих предыдущих задачах квадратичные функции, задающие как функцию цели, так и ограничения, были однородными и не содержали линейных членов. В последней же задаче булевы ограничения содержат линейные члены, и, в силу этого, нахождение лагранжевой двойственной оценки для задачи (6.34)–(6.38) потребует дополнительных усилий – требуется решить систему линейных уравнений для нахождения решения внутренней задачи.

Пусть $w \in E^m$ ($m_3 = nk$) – вектор множителей Лагранжа, соответствующий ограничениям (6.38). Тогда задаче (6.34)–(6.38) соответствует такая нижняя двойственная оценка:

$$\psi_3^* = \sup_{u, v, V, w: K(u, v, V, w) \succeq 0} \psi_3(u, v, V, w), \quad (6.39)$$

где

$$\psi_3(u, v, V, w) = \inf_{x \in E^{kn}} \left\{ \left(K(u, v, V, w)x, x \right) - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n w_{ij} x_{ij} - \sum_{i=1}^k u_{ii} \right\}.$$

Здесь $K(u, v, V, w) \succeq 0$ обозначает неотрицательную определенность семейства симметричных матриц

$$K(u, v, V, w) = K(u, v, V) + \text{diag} \{ w_{11}, \dots, w_{1n}, \dots, w_{k1}, \dots, w_{kn} \}.$$

Анализ двойственных оценок. Проведем анализ полученных задач оптимизации (6.27), (6.33) и (6.39) для определения нижних оценок ψ_1^* , ψ_2^* и ψ_3^* , связанный со специальным видом квадратичной функции $f(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k)$, которая не содержит членов вида $\vec{x}_i^T A \vec{x}_j$ для $i \neq j$.

Для квадратичной задачи (6.27) отметим следующее. Двойственные переменные $\{u_{ij}, i = \overline{1, k-1}, j = \overline{i+1, k}\}$ не входят в целевую функцию задачи (6.27), и когда они принимают нулевые значения, область неотрицательной определенности матрицы $K(u)$ относительно других переменных максимальна (для того, чтобы матрица была неотрицательно определена, диагональные блоки должны быть также неотрицательно определены). Поэтому их можно обнулить: $u_{ij}^* = 0, i = \overline{1, k-1}, j = \overline{i+1, k}$. В результате задача (6.27) будет зависеть только от $\{u_{ii}, i = \overline{1, k}\}$;

Аналогичные рассуждения для задачи (6.33) дают такой вывод. Для нее еще больше переменных оказываются избыточными (не влияют на результат): $v^* = \mathbf{0}_{m_1}$ (где $\mathbf{0}_{m_1}$ — m_1 -компонентный нулевой вектор), $m_1 = k \frac{n(n-1)}{2}$, $V^* = \mathbf{0}_{m_2}$, $m_2 = n \frac{k(k-1)}{2}$ (заметим, что если матрица K_0 изначально не приведена к диагональному виду, то $v^* \neq \mathbf{0}_{m_1}$, поскольку как раз переменные v обнуляют все недиагональные элементы). Таким образом, как и в предыдущем варианте, размерность задачи (6.33) равна k (размерности вектора переменных $\{u_{ii}, i = \overline{1, k}\}$). Оценка ψ_2^* (как и ψ_1^*) в общем случае не точная, поскольку учитывает лишь нормированность векторов, а остальные условия задач (6.24)–(6.26) и (6.28)–(6.32) не принимаются во внимание.

Решение задачи (6.27), соответствующей нахождению оценки ψ_1^* можно

свести к решению безусловной задачи максимизации вогнутой функции, установив точное значение штрафного множителя с помощью теоремы 6.1. Справедливо следующее утверждение:

Теорема 6.3 При $N > k$ точки минимума задачи (6.27) и задачи $\max_u \left(-\sum_{i=1}^k u_{ii} + N \cdot \min \left\{ 0, \lambda_{\min}(K(u)) \right\} \right)$ совпадают.

Доказательство. Чтобы воспользоваться теоремой 6.1, перепишем задачу (6.27), соответствующую нахождению ψ_1^* , в виде задачи минимизации, предварительно записав условие положительной определенности матрицы $K(u)$ в виде $\lambda_{\min}(K(u)) \geq 0$, где $\lambda_{\min}(K(u))$ – минимальное собственное число матрицы $K(u)$:

$$\psi_1^* = \max_{\lambda_{\min}(K(u)) \geq 0} \left(-\sum_{i=1}^k u_{ii} \right) = - \min_{\lambda_{\max}(-K(u)) \leq 0} \sum_{i=1}^k u_{ii}$$

Тогда

$$\begin{aligned} V(t) &= \inf_u \left\{ \sum_{i=1}^k u_{ii} : \lambda_{\max}(-K(u)) \leq t \right\} = \\ &= \inf_u \left\{ \sum_{i=1}^k u_{ii} : \lambda_{\max} \left(-K_0 - \sum_{i=1}^k u_{ii} K_{ii} - tI \right) \leq 0 \right\} = \\ &= \inf_u \left\{ \sum_{i=1}^k (\tilde{u}_{ii} - t) : \lambda_{\max} \left(-K_0 - \sum_{i=1}^k \tilde{u}_{ii} K_{ii} \right) \leq 0 \right\} = \\ &= \inf_u \left\{ \sum_{i=1}^k \tilde{u}_{ii} - kt : \lambda_{\max}(-K(\tilde{u})) \leq 0 \right\} = \\ &= V(0) - kt, \end{aligned}$$

где $\tilde{u}_{ii} = u_{ii} + t$, $i = \overline{1, k}$. Подставляя полученное выражение $V(t)$ в формулу для определения множителя L , получаем

$$\inf_{t>0} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \inf_{t>0} \frac{V(0) - kt - V(0)}{t} = -k = -L > -\infty.$$

Таким образом, в соответствии с теоремой 6.1,

$$\begin{aligned}\psi_1^* &= - \min_{\lambda_{\max}(-K(u)) \leq 0} \sum_{i=1}^k u_{ii} = \\ &= - \min_u \left(\sum_{i=1}^k u_{ii} + N \cdot \max \left\{ 0, \lambda_{\max}(-K(u)) \right\} \right) = \\ &= \max_u \left(- \sum_{i=1}^k u_{ii} + N \cdot \min \left\{ 0, \lambda_{\min}(K(u)) \right\} \right).\end{aligned}$$

Доказательство завершено. \square

Аналогичная теорема справедлива и для оценки ψ_2^* , в силу однородности квадратичных функций в соответствующей ей формулировке квадратичной задачи. Решение задачи (6.33), соответствующей нахождению оценки ψ_2^* , можно свести к решению безусловной задачи оптимизации с помощью следующего утверждения.

Теорема 6.4 При $N > k$ точки минимума задачи (6.33) и задачи

$$\max_u \left(- \sum_{i=1}^k u_{ii} + N \cdot \min \left\{ 0, \lambda_{\min}(K(u, v, V)) \right\} \right) \text{ совпадают.}$$

Теоремы (6.3) и (6.4) носят общий характер, и их можно перенести на случай квадратичной задачи, когда целевая функция является однородной функцией общего вида.

Самыми интересными оказались свойства оценки ψ_3^* , связанной с задачей (6.39). Она также ориентирована на специальный вид квадратичной функции цели и связана с линейной булевой задачей о назначениях. Справедливо следующее утверждение.

Теорема 6.5 Для оценки ψ_3^* справедливо $\psi_3^* \geq F^*$, где F^* – оптимальное решение следующей задачи линейного программирования

$$\begin{aligned}F^* &= \min \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n a_{ijj} x_{ij}, \\ \sum_{j=1}^n x_{ij} &= 1, \quad i = 1, \dots, k,\end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^k x_{ij} \leq 1, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$0 \leq x_{ij} \leq 1, \quad i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n.$$

Доказательство. Для доказательства теоремы 6.5 достаточно показать, что из квадратичной формулировки задачи (6.34)–(6.38) следуют ограничения для указанной задачи линейного программирования. Так, ограничения

$$\sum_{j=1}^n x_{ij} = 1, \quad i = 1, \dots, k,$$

следуют из линейной комбинации ограничений (6.35) и (6.38). Ограничения

$$\sum_{i=1}^k x_{ij} \leq 1, \quad j = 1, \dots, n,$$

следуют из релаксации квадратичных ограничений в форме равенств

$$\left(\sum_{i=1}^k x_{ij} \right)^2 - \sum_{i=1}^k x_{ij} = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

которые легко получить линейной комбинацией ограничений (6.37) и (6.38).

И, наконец, ограничения

$$0 \leq x_{ij} \leq 1, \quad i = 1, \dots, k, j = 1, \dots, n$$

является следствием релаксации булевых ограничений (6.38). \square

Из теоремы 6.5 следует, что если $a_{ijj} \geq 0$ для всех $i = 1, \dots, k$ и $j = 1, \dots, n$, то нижняя оценка ψ_3^* является точной оценкой для Q_3^* , т.е. $\psi_3^* = Q_3^*$. Связано это с тем, что задача линейного программирования из теоремы 6.5 может быть расширена до задачи линейного программирования, которая следует из релаксации булевой задачи о назначениях (6.20)–(6.23).

Тестовые эксперименты. Эффективность оценок ψ_1^* , ψ_2^* и ψ_3^* исследовалась на ряде тестовых задач. Для их нахождения использовалась программа DSQTPR [199], с помощью которой можно находить лагранжевы двойственные оценки в квадратичных задачах общего вида. Приведем результаты решения некоторых тестовых примеров.

Пример 1. Рассмотрим задачу (6.18)–(6.19), где

$$A_1 = \text{diag}(-1, 2, 3), \quad A_2 = \text{diag}(4, -5, 6), \quad A_3 = \text{diag}(7, 8, -9).$$

Целевая функция имеет вид

$$f(x) = -x_{11}^2 + 2x_{12}^2 + 3x_{13}^2 + 4x_{21}^2 - 5x_{22}^2 + 6x_{23}^2 + 7x_{31}^2 + 8x_{32}^2 - 9x_{33}^2,$$

множество допустимых решений состоит из $8 = 2^3$ точек следующего вида:

$$x^* = ((\pm 1, 0, 0)^T, (0, \pm 1, 0)^T, (0, 0, \pm 1)^T).$$

Оптимальное значение целевой функции равно сумме отрицательных компонент матриц A_i , т. е. для вариантов (R) и (Z) имеем $Q_1^* = Q_2^* = -15$. Для варианта (N) также $Q_3^* = -15$, но решением будет единственная точка $x^* = ((1, 0, 0)^T, (0, 1, 0)^T, (0, 0, 1)^T)$.

Для первого примера все двойственные оценки являются точными, т.е.

$$\psi_1^* = -15 = Q_1^*, \quad \psi_2^* = -15 = Q_2^*, \quad \psi_3^* = -15 = Q_3^*.$$

Кроме того, для варианта (N) программа DSQTPR обеспечивает нахождение точного оптимального решения задачи по переменным x^* .

Пример 2. Заданы матрицы

$$A_1 = \text{diag}(1, 2, 3), \quad A_2 = \text{diag}(4, 5, 6), \quad A_3 = \text{diag}(7, 8, 9),$$

т.е. целевая функция имеет вид

$$f(x) = x_{11}^2 + 2x_{12}^2 + 3x_{13}^2 + 4x_{21}^2 + 5x_{22}^2 + 6x_{23}^2 + 7x_{31}^2 + 8x_{32}^2 + 9x_{33}^2.$$

Для данного примера $Q_1^* = Q_2^* = Q_3^* = 15$, оценки $\psi_1^* = \psi_2^* = 12$ не являются точными, оценка $\psi_3^* = 15$.

Пример 3. Заданы матрицы

$$A_1 = \left\{ \begin{array}{ccc} 3 & 7/2 & -2 \\ 7/2 & 6 & -9 \\ -2 & -9 & 4 \end{array} \right\} \text{ и } A_2 = \left\{ \begin{array}{ccc} -3 & -3 & 7/2 \\ -3 & 5 & -6 \\ 7/2 & -6 & 3 \end{array} \right\},$$

т. е. целевая функция имеет вид

$$f(x) = 3x_{11}^2 + 6x_{12}^2 + 4x_{13}^2 + 7x_{11}x_{12} - 4x_{11}x_{13} - 7x_{12}x_{13} - \\ - 3x_{21}^2 + 5x_{22}^2 + 3x_{23}^2 - 6x_{21}x_{22} - 7x_{21}x_{23} - 12x_{22}x_{23}.$$

Здесь оценка $\psi_1^* = -8,78798$. Точная двойственная оценка для этого примера равна $-8,50412$. Ее получил О.А. Березовский в работе [3], где он расширил формулировку квадратичной задачи до $k = n$ и для улучшения точности оценок использовал функционально избыточные квадратичные ограничения, вытекающие из свойства ортонормированных векторов, когда $k = n$.

6.3 Оптимальные нормированные векторы конечного продукта и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева

Рассматривается задача нелинейного программирования с билинейной целевой функцией, линейными ограничениями для прямой и двойственной моделей Леонтьева, двумя квадратичными равенствами, нормирующими векторы конечного продукта и добавленной стоимости. Если матрица Леонтьева (матрица коэффициентов прямых затрат) продуктивна, то оптимальное решение задачи выражается через собственные векторы, соответствующие максимальным собственным числам некоторых неотрицательных симметричных матриц. Если матрица Леонтьева продуктивна и неразложима, то задача имеет единственное решение, которое интерпретируется как оптимальные нормированные структуры конечного продукта и добавленной стоимости для экономики по Леонтьеву. Приведены расчеты для 15-отраслевого баланса Украины за 2003-2009 годы.

Леонтьевские модели „затраты-выпуск“ и равновесных цен являются ключом ко многим проблемам экономики. Так, например, с их помощью профессор Г. Д. Курц (университет Граца, Австрия) исследует проблему добавленной стоимости, использование основного капитала и проблему технических изменений [183], профессор Г. Бортис (университет Фрибурга, Швейцария) исследует связь между структурой труда и заработной платы [161, 6]. В данном подразделе исследуются оптимальные соотношения между основными векторными величинами леонтьевской экономики, такими как валовой и конечный продукт, цены и нормы добавленной стоимости. Величины, характеризующие оптимальные соотношения, тесно связаны с максимальным сингулярным числом неотрицательных матриц.

Матрицы Леонтьева A и B . Рассматривается экономика с n чистыми отраслями, т.е. каждая отрасль производит один вид продукта и разные отрасли выпускают разные продукты. Пусть $A \geq 0$ – неотрицательная $n \times n$ -матрица

$$A = \{a_{ij}\}, \quad i, j = \overline{1, n},$$

где коэффициент $a_{ij} \geq 0$ обозначает величину затрат продукта отрасли i на изготовление единицы продукта отрасли j . Величины a_{ij} могут быть заданы в натуральном или в стоимостном выражении [32, 35]. Матрица A называется матрицей Леонтьева (матрицей коэффициентов прямых затрат, матрицей технологических коэффициентов). Для экономики страны (региона) матрица A несет информацию о сложившейся структуре межотраслевых связей, о существующей технологии общественного производства и т.д.

Матрицу A называют неразложимой, если одновременной перестановкой строк и столбцов ее нельзя привести к виду

$$A = \begin{Bmatrix} A_1 & A_2 \\ 0 & A_3 \end{Bmatrix},$$

где A_1 и A_3 – квадратные подматрицы размеров $k \times k$ и $(n-k) \times (n-k)$, соответственно. Неразложимость матрицы A означает, что каждая отрасль использует (хотя бы косвенно) продукты всех других отраслей.

Пусть λ_A – число Фробениуса, оно равно $\lambda_{max}(A)$ – максимальному собственному числу матрицы A . Число Фробениуса λ_A для неотрицательной матрицы $A \geq 0$ всегда положительно и не меньше, чем абсолютное значение любого другого собственного числа матрицы A (теорема Фробениуса–Перрона).

Теорема 6.6 ([1], теорема 1.5) *Неотрицательная матрица A продуктивна тогда и только тогда, когда $\lambda_A < 1$.*

Если матрица A является продуктивной, то неотрицательной будет матрица

$$B = (I - A)^{-1},$$

где I – единичная $n \times n$ -матрица. Матрица B называется матрицей коэффициентов полных затрат (обратной матрицей Леонтьева). Для продуктивной матрицы A и соответствующей ей матрицы B числа Фробениуса связаны соотношениями

$$\lambda_B = \frac{1}{1 - \lambda_A} \quad \text{и} \quad \lambda_A = 1 - \frac{1}{\lambda_B}.$$

Прямая и двойственная модели Леонтьева. Прямой моделью Леонтьева является модель „затраты-выпуск“, описываемая равенством

$$y = (I - A)x, \quad (6.40)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ – вектор валового продукта и $y = (y_1, \dots, y_n)^T$ – вектор конечного продукта, I – единичная $n \times n$ -матрица. Здесь и далее T – символ транспонирования. Если матрица A является продуктивной, то

$$x = By, \quad \text{где} \quad x \geq 0 \quad \text{для любого} \quad y \geq 0. \quad (6.41)$$

Двойственной моделью Леонтьева является модель равновесных цен, описываемая равенством

$$w = (I - A^T)p, \quad (6.42)$$

где $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)^T$ – вектор цен (p_i – цена единицы продукта i -ой отрасли), $w = (w_1, w_2, \dots, w_n)^T$ – вектор норм добавленной стоимости. Если матрица A является продуктивной, то

$$p = B^T w, \quad \text{где} \quad p \geq 0 \quad \text{для любого} \quad w \geq 0. \quad (6.43)$$

Прямую и двойственную модели Леонтьева связывает соотношение

$$p^T y = w^T x, \quad (6.44)$$

которое означает, что национальный продукт совпадает с национальным доходом. Соотношение (6.44) следует из справедливости следующей цепочки равенств

$$p^T y = p^T (I - A)x = ((I - A^T)p)^T x = w^T x.$$

Квадратичная экстремальная задача. Пусть вектор $y \geq 0$, ($\|y\| = 1$) задает нормированную структуру конечного выпуска продукции в прямой

модели Леонтьева (6.40), а вектор $c \geq 0$ ($\|c\| = 1$) задает нормированную структуру добавленной стоимости в двойственной модели Леонтьева (6.42). Здесь $\|\cdot\|$ – евклидова норма вектора.

Рассмотрим следующую задачу нелинейного программирования [100]

$$f^* = (p^*)^T y^* = \max_{y \in E^n, p \in E^n} p^T y \quad \equiv \quad \max_{x \in E^n, w \in E^n} w^T x = (w^*)^T x^* \quad (6.45)$$

при ограничениях

$$y = (I - A)x, \quad x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad (6.46)$$

$$w = (I - A^T)p, \quad p \geq 0, \quad w \geq 0, \quad (6.47)$$

$$\|y\|^2 = 1, \quad \|w\|^2 = 1, \quad (6.48)$$

где матрица A – заданная матрица Леонтьева (неотрицательная $n \times n$ -матрица), а неизвестными являются компоненты n -мерных векторов x , y , p , w .

Условие эквивалентности „ \equiv “ в целевой функции (6.45) означает использование либо целевой функции $p^T y$, либо $w^T x$. Это следует из справедливости соотношения (6.44), которое связывает прямую и двойственную модели Леонтьева, заданные ограничениями (6.46) и (6.47) соответственно. Следовательно, в задаче (6.45)–(6.48) требуется найти такие нормированные векторы конечного выпуска (вектор y^*) и добавленной стоимости (вектор w^*), чтобы с точностью до некоторого постоянного множителя максимума достигал национальный продукт (равный национальному доходу). Оптимальным значениям векторов y^* и w^* будут соответствовать такие значения векторов x^* и p^* , которые с точностью до постоянных множителей будут определять оптимальный валовой продукт в прямой модели Леонтьева и оптимальные цены в двойственной модели Леонтьева.

В общем случае нахождение векторов y^* и w^* , x^* и p^* требует использования численных методов оптимизации для решения квадратичной экстремальной задачи (6.45)–(6.48). Здесь целевая функция (6.45) является билинейной функцией либо от переменных p и y , либо от переменных w и x , а ограничения (6.48) содержат два квадратичных равенства. Однако оказывается, что

в важных для экономических приложений случаях задача (6.45)–(6.48) может быть решена аналитически в терминах собственных чисел и собственных векторов симметричных матриц.

Алгоритм для продуктивной матрицы A . Если матрица A продуктивна и матрица $B = (I - A)^{-1}$, то задачу (6.45)–(6.48) можно решить в два этапа:

Этап 1. Находим векторы y^* и w^* как решение квадратичной задачи

$$f^* = (w^*)^T B y^* = \max_{y \geq 0, w \geq 0} w^T B y \quad (6.49)$$

при ограничениях

$$\sum_{i=1}^n y_i^2 = 1, \quad \sum_{i=1}^n w_i^2 = 1. \quad (6.50)$$

Этап 2. Вычисляем $x^* = B y^*$ и $p^* = B^T w^*$.

Теорема 6.7 ([101], теорема 1) *Если матрица A продуктивна, то решение задачи (6.45)–(6.48) имеет вид*

$$y^* = \xi, \quad x^* = B y^*, \quad w^* = \eta, \quad p^* = B^T w^*,$$

где ξ и η – неотрицательные нормированные собственные векторы матриц $B^T B$ и $B B^T$, соответствующие их максимальным собственным числам $\lambda_{\max}(B^T B)$ и $\lambda_{\max}(B B^T)$. Оптимальное значение целевой функции (6.45) равно

$$f^* = \sqrt{\lambda_{\max}(B^T B)} = \sqrt{\lambda_{\max}(B B^T)} = \sigma_B, \quad (6.51)$$

где σ_B – максимальное сингулярное число матрицы B .

Для продуктивной матрицы A векторы y^* и w^* не обязательно определяются единственным образом. Для их единственности достаточно, чтобы продуктивная матрица A была еще и неразложимой.

Теорема 6.8 ([108], теорема 2) *Если матрица Леонтьева A – продуктивна и неразложима, ей соответствует матрица $B = (I - A)^{-1}$, то задача*

(6.45)–(6.48) имеет единственное решение, все компоненты которого положительны. Это решение имеет вид

$$y^* = \xi, \quad x^* = By^*, \quad w^* = \eta, \quad p^* = B^T w^*,$$

где ξ и η – положительные нормированные собственные векторы матриц $B^T B$ и BB^T , соответствующие их максимальным собственным числам $\lambda_{\max}(B^T B)$ и $\lambda_{\max}(BB^T)$.

Дадим эквивалентную формулировку теоремы 6.8, которая проясняет содержательный смысл собственных векторов и максимального сингулярного числа.

Теорема 6.9 Если матрица A продуктивна и неразложима, σ_B – максимальное сингулярное число матрицы $B = (I - A)^{-1}$, тогда задача (6.45)–(6.48) имеет единственное решение

$$f^* = \sigma_B, \quad y^* = \xi, \quad x^* = \sigma_B \eta, \quad w^* = \eta, \quad p^* = \sigma_B \xi,$$

где ξ и η – положительные нормированные собственные векторы матриц $B^T B$ и BB^T , соответствующие их максимальным собственным числам.

Для продуктивной и неразложимой матрицы Леонтьева A теорема 6.9 определяет оптимальную нормированную структуру конечного продукта (вектор y^*) и оптимальную нормированную структуру добавленной стоимости (вектор w^*). Первой соответствуют компоненты собственного вектора ξ , а второй – компоненты собственного вектора η .

Векторы y^* и w^* для Украины (15 отраслей.) Межотраслевой баланс экономики Украины с 2000 года ведется по 38 отраслям (кодам видов экономической деятельности). Он публикуется в ежегодных статистических сборниках Госкомстата Украины, (см. <http://www.ukrstat.gov.ua>). Широко используется агрегированный 15-отраслевой баланс, который построен в результате объединения нескольких отраслей из 38-отраслевого баланса в одну агрегированную: так, например, добыча угля и торфа, добыча углеводородов и добыча неэнергетических материалов группируются в сектор добываю-

№	Название отрасли	№ отрасли	1	2	3	4	5
1	Сельское хозяйство, охотничье и лесное хозяйство		0,25644	0,07763	0,00214	0,03313	0,00017
2	Рыбное хозяйство		0,00017	0,07457	0,00001	0,00049	0,00001
3	Добывающая промышленность		0,01008	0,00367	0,06446	0,11893	0,33387
4	Перерабатывающая промышленность		0,18065	0,18032	0,15941	0,29734	0,11449
5	Производство и распределение электроэнергии, газа и воды		0,01163	0,02934	0,08042	0,02750	0,07150
6	Строительство		0,00019	0,00000	0,00107	0,00025	0,00176
7	Торговля, ремонт автомобилей, бытовых изделий и предметов личного пользования		0,12371	0,21394	0,06930	0,20672	0,00137
8	Деятельность гостиниц и ресторанов		0,00025	0,00122	0,00194	0,00116	0,00254
9	Деятельность транспорта и связи		0,04232	0,08924	0,12953	0,04982	0,01114
10	Финансовая деятельность		0,00225	0,00428	0,00749	0,00809	0,01582
11	Операции с недвижимым имуществом, аренда, инжиниринг и предоставление услуг		0,00860	0,01284	0,01234	0,01477	0,01549
12	Государственное управление		0,00032	0,00122	0,00207	0,00242	0,00726
13	Образование		0,00006	0,00000	0,00042	0,00011	0,00052
14	Здравоохранение и предоставление соц. помощи		0,00032	0,00244	0,00134	0,00045	0,00093
15	Предоставление коммунальных и индивидуальных услуг, деятельность в сфере культуры и спорта		0,00018	0,00061	0,00151	0,00083	0,00222

Рис. 6.2. Фрагмент 15-отраслевой матрицы Леонтьева A за 2009 год

щей промышленности. Названия всех 15 агрегированных отраслей приведены на рис. 6.2 для фрагмента матрицы Леонтьева за 2009 год.

На рис. 6.3 наведены оптимальные нормированные структуры конечного продукта (векторы y^*) и оптимальные нормированные структуры добавленной стоимости (векторы w^*) для 15-отраслевых матриц Леонтьева [109, 5]. Эти матрицы построены на основе таблиц „затраты-выпуск“ в ценах потребителей за 2003–2009 годы [59]. Использовался следующий способ их построения. Для каждой отрасли j из таблиц были взяты ее валовый выпуск V_j и объем продукции \tilde{a}_{ij} отрасли i , израсходованный отраслью j в процессе производства. Коэффициенты матрицы Леонтьева a_{ij} получены в результате деления этих чисел: $a_{ij} = \tilde{a}_{ij}/V_j$.

Из рис. 6.3 видно достаточно высокую устойчивость компонент для ряда отраслей в парах векторов y^* и w^* для разных лет. Кроме того, максимальные сингулярные числа σ_B на 20-25% больше, чем числа Фробениуса λ_B . Это означает, что по критерию максимизации национального дохода оптимальные нормированные структуры конечного выпуска и добавленной стоимости

	2003		2004		2005		2006		2007		2008		2009	
λ_B	2.418		2.408		2.476		2.409		2.338		2.305		2.323	
σ_B	2,914		2,937		3,107		2,980		2,865		2,884		2,866	
	y^*	w^*												
1	0,26	0,24	0,26	0,21	0,27	0,20	0,28	0,20	0,28	0,20	0,28	0,18	0,28	0,19
2	0,28	0,10	0,26	0,09	0,30	0,10	0,29	0,10	0,27	0,10	0,28	0,11	0,26	0,10
3	0,33	0,35	0,32	0,33	0,30	0,29	0,28	0,28	0,25	0,25	0,24	0,27	0,28	0,30
4	0,55	0,76	0,57	0,78	0,55	0,81	0,55	0,80	0,56	0,78	0,56	0,79	0,54	0,76
5	0,26	0,20	0,24	0,17	0,22	0,16	0,22	0,16	0,23	0,16	0,23	0,16	0,25	0,18
6	0,30	0,11	0,33	0,12	0,33	0,12	0,35	0,12	0,35	0,14	0,38	0,14	0,37	0,14
7	0,19	0,27	0,17	0,26	0,23	0,29	0,24	0,30	0,23	0,32	0,22	0,30	0,23	0,32
8	0,27	0,10	0,26	0,10	0,28	0,09	0,24	0,09	0,23	0,09	0,22	0,09	0,25	0,10
9	0,21	0,22	0,21	0,24	0,23	0,22	0,24	0,23	0,26	0,24	0,26	0,25	0,25	0,26
10	0,12	0,11	0,11	0,14	0,09	0,09	0,07	0,07	0,08	0,09	0,07	0,08	0,06	0,07
11	0,17	0,15	0,17	0,16	0,16	0,14	0,19	0,16	0,21	0,20	0,19	0,18	0,21	0,22
12	0,15	0,06	0,16	0,07	0,11	0,05	0,10	0,04	0,11	0,05	0,12	0,05	0,09	0,04
13	0,10	0,04	0,09	0,03	0,10	0,03	0,10	0,04	0,09	0,03	0,10	0,04	0,11	0,04
14	0,18	0,07	0,18	0,07	0,17	0,06	0,17	0,06	0,17	0,06	0,17	0,06	0,17	0,06
15	0,16	0,07	0,16	0,07	0,15	0,06	0,15	0,07	0,15	0,08	0,13	0,07	0,14	0,08

Рис. 6.3. Оптимальные векторы y^* и w^* (Украина, 15 отраслей)

лучше, чем их нормированные аналоги, равные векторам Фробениуса.

Похожая ситуация имеет место для 22-отраслевых матриц Леонтьева (таблицы 8.1) из системы таблиц "затраты-выпуск" России за 2001-2003 годы. Оптимальные векторы y^* и w^* для этих матриц приведены в работе [112].

Заключение. Модель (6.45)–(6.48), объединяющая прямую и двойственную статические модели Леонтьева, позволяет использовать для анализа экономической системы сингулярные числа и собственные векторы некоторых симметричных матриц. С их помощью можно исследовать связи между затратами на производство продукции и ценами при распределении продукции в экономической системе. Это дополняет арсенал средств для анализа качественных свойств леонтьевских моделей, который можно осуществить с помощью чисел и векторов Фробениуса.

6.4 Основные результаты раздела 6

Основные результаты раздела состоят в следующем.

1. Сформулирована квадратичная экстремальная задача для нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами

вершин в обоих подмножествах разбиения вершин графа. Разработан и программно реализован алгоритм получения двойственной оценки. С помощью точных штрафных функций показано, что ее нахождение сводится к решению безусловной задачи минимизации выпуклой функции.

2. Исследована задача глобальной оптимизации, связанная с нахождением минимума специального вида квадратичной однородной функции на многообразии Штифеля (наборе k ортонормированных векторов в E^n , $k \leq n$). Предложены квадратичные оптимизационные задачи для трех вариантов этой задачи, которые отличаются ограничениями на компоненты ортонормированных векторов. Рассмотрены двойственные оценки для каждой из задач и на тестовых примерах показана их эффективность.
3. Сформулирована квадратичная экстремальная задача с билинейной целевой функцией, линейными ограничениями для прямой и двойственной моделей Леонтьева, двумя квадратичными равенствами, нормирующими векторы конечного выпуска и добавленной стоимости. Показано, что если матрица Леонтьева продуктивна, то оптимальное решение задачи выражается через собственные векторы, соответствующие максимальным собственным числам некоторых неотрицательных симметричных матриц. Если матрица Леонтьева продуктивна и неразложима, то задача имеет единственное решение, которое интерпретируется как оптимальные нормированные структуры конечного выпуска и добавленной стоимости для экономики по Леонтьеву. Приведены расчеты для 15-отраслевых матриц Леонтьева, которые построены на основе таблиц 38-отраслевого баланса Украины за 2003-2009 годы.

Результаты опубликованы в семи¹ статьях (из них 6 в фаховых изданиях) и докладывались на шести² конференциях различного уровня.

¹[145] Шор Н.З., Стецюк П.И., Березовский О.А. Двойственные оценки для специальной оптимизационной задачи квадратичного типа на многообразии Штиффеля // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2004. – С.3–10. [84] Стецюк П.И., Березовский О.А. Лагранжевые оценки для максимального разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – С.31–38. [100] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б., Пилиповский А.В. О задаче оптимального соотношения между спросом и добавленной стоимостью в моделях Леонтьева // Теория оптимальных решений. – 2010. – №9. – С.136–143. [101] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Оптимальная нормированная структура спроса и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева // Кибернетика и систем. анализ. – 2010. – №5. – С.51–59. [109] Стецюк П.И., Бондаренко А.В. О спектральных свойствах модели Леонтьева // Теория оптимальных решений. – 2011. – №10. – С.84–90. [108] П.И.Стецюк, Л.Б.Кошлай Об одной экстремальной задаче для связи прямой и двойственной моделей Леонтьева // Спектральные и эволюционные задачи. – 2011. – Т. 2. – №2. – С. 164–169. [116] Стецюк П.И. Оптимальные нормированные векторы конечного продукта и добавленной стоимости в продуктовой модели Леонтьева // В книге Стохастическое программирование и его приложения / П.С. Кнопов, В.И. Зоркальцев, Я.М. Иванько и др. – Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. – С. 483–492.

²[146] Шор Н.З., Стецюк П.И., Березовский О.А. Нахождение оценок глобального экстремума в задачах на многообразии Штиффеля // Автоматика-2004, Материалы 11-й международной конференции по автоматическому управлению, 27–30 сентября, 2004, том первый, Национальный университет пищевых технологий. Киев, 2004. – С. 47. [105] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одной экстремальной задаче для связи прямой и двойственной моделей Леонтьева // XXI ежегодная международная конференция (KROMSH-2010), (Крым, Севастополь, 18–29 сентября 2010), КНЦ НАНУ, 2010, с. 56. [5] Бондаренко А.В., Кошлай Л.Б., Стецюк П.И. Об одной задаче нахождения оптимальной структуры спроса и добавленной стоимости // Математичні методи, моделі та інформаційні технології в економіці. – Матеріали II Міжнародної науково-методичної конференції – Чернівці: ДрукАрт, 2011. – С. 26 – 27. [111] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одной оптимизационной задаче для моделей Леонтьева // XXII ежегодная международная конференция (KROMSH-2011), (Крым, Севастополь, 18–29 сентября 2011), КНЦ НАНУ, 2011, с. 51. [112] Стецюк П. И. О спектральных свойствах матриц Леонтьева // Статистика. Моделирование. Оптимизация: сборник трудов Всероссийской конференции (Челябинск, 28 ноября – 3 декабря 2011 г.). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – Р. 173–178. [208] Stetsyuk P. On one nonlinear optimization problem for Leontief models // 25th European Conference on Operational Research, 8–11 July 2012. Vilnius, Lithuania, p. 141.

Раздел 7

Прикладные экстремальные задачи

В разделе рассмотрены математические модели и методы решения для ряда прикладных экстремальных задач, где существенную роль играют субградиентные методы минимизации негладких функций. В подразделе 7.1 рассмотрены математические модели, методы и программное обеспечение для двух семейств задач нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети [26, 70]. Математические модели представлены задачами линейного программирования большой размерности с блочной структурой матрицы ограничений. В подразделе 7.2 рассмотрены две задачи для нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий, которые сформулированы как многоэкстремальные задачи нелинейного программирования со сложным видом целевой функции [81, 79]. Обсуждаются вопросы нахождения локальных экстремумов этих задач с помощью методов первого порядка и анализируются способы вычисления градиента целевой функции в зависимости от количества слоев в оптическом покрытии. В подразделе 7.3 рассмотрено семейство математических моделей для определения электрических нагрузок параллельно работающих энергоблоков в энергосистеме с возможностью управления загрузкой (маневренностью) отдельного семейства энергоблоков [96, 118]. Математические модели представлены специальными задачами нелинейного программирования с непрерывными переменными: требуется минимизировать нелинейную сепарабельную функцию при линейных и выпуклых ограничениях на переменные. В подразделе 7.4 рассмотрена проблема поиска вектора минимальной длины в выпуклой оболочке векторов конечного набора точек конечномерного евклидова пространства. Она сводится к эквивалентной негладкой экстремальной задаче, для которой устанавливается величина штрафного параметра. Для решения последней предлагается использовать алгоритмы субградиентного спуска с преобразованием пространства [99].

7.1 Задачи нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети

Рассмотрены математические модели, методы и программное обеспечение для двух семейств задач нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети. Математические модели представлены большими размерными задачами линейного программирования с блочной структурой матрицы ограничений.

Понятие “повреждение сети” является центральным в данном подразделе при описании математических моделей надежных сетей, т.е. сетей, которые могут функционировать в случае повреждений в сети. Повреждением сети будем называть такое ее состояние, при котором уменьшаются пропускные способности одной или нескольких ее дуг. Конкретизируем понятие “повреждение сети” для ориентированной сети, применяя такие обозначения.

Пусть $N(V, A)$ – ориентированная сеть с множеством вершин V и множеством дуг A . Дугу сети $N(V, A)$, направленную из вершины $i \in V$ в вершину $j \in V$, обозначим $(i, j) \in A$. Пусть $Y = \{y_{ij}, (i, j) \in A\}$ – вектор неотрицательных значений пропускных способностей дуг сети $N(V, A)$. Будем считать, что повреждению сети $N(V, A)$ отвечает такое ее состояние, при котором значения пропускных способностей дуг сети $N(V, A)$ становятся такими: $Y' = \{y'_{ij}, (i, j) \in A\}$, где $y'_{ij} = \mu_{ij}y_{ij}$, $0 \leq \mu_{ij} \leq 1$, $(i, j) \in A$. Если $\mu_{ij} = 0$ для дуги $(i, j) \in A$, то при повреждении сети $N(V, A)$ это будет равносильно полному отказу этой дуги, т.е. пропускная способность дуги (i, j) равна нулю ($y'_{ij} = 0$), и пересылать по ней поток невозможно. Если $\mu_{ij} = 1$, то при повреждении сети $N(V, A)$ это означает полноценное функционирование дуги (i, j) , т.е. пропускная способность дуги (i, j) остается такой же, как и до повреждения ($y'_{ij} = y_{ij}$), а максимальный объем потока, который можно переслать по этой дуге, также не изменяется. Кроме того возможны и различные промежуточные состояния, когда $0 < \mu_{ij} < 1$.

С помощью введенного выше понятия „повреждения сети“ можно описать разнообразные аварийные ситуации для функционирующих сетей различного

типа: автодорожных, железнодорожных, коммуникационных и других.

Отметим, что отдельным примером повреждения сети является ситуация, связанная с единичными отказами дуг сети $N(V, A)$, когда отказать может только одна, но произвольная дуга. В этом случае количество возможных повреждений T будет равно количеству дуг сети $N(V, A)$.

Ситуацию, связанную с полным отказом некоторого заданного списка дуг, также можно описать подобным образом. В этом случае, как и при единичных отказах, параметр μ_{ij} может равняться либо единице, либо нулю.

Далее рассмотрим две задачи нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети. Для них надежной сетью считается такая ориентированная сеть, для которой можно удовлетворить все заданные требования на передачу объемов потока в сети как при отсутствии повреждений в сети, так и в том случае, когда произойдет только одно повреждение, но произвольное из всех возможных повреждений сети. Повреждения в ориентированной сети заданы списком возможных повреждений, где каждым отдельным повреждением является уменьшение пропускной способности одной или сразу нескольких дуг ориентированной сети.

Задача нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети с передачей потоков по произвольным путям. При формулировании математической модели задачи будем использовать такие входные данные:

- (i) ориентированная сеть $N(V, A)$ задана множеством вершин V и множеством дуг A . Для дуги $(i, j) \in A$ обозначим c_{ij} стоимость создания единицы пропускной способности, а y_{ij}^0 – имеющийся в наличии ресурс пропускной способности;
- (ii) задано множество требований D по объемам потоков между парами вершин из некоторого подмножества $V_0 \subset V$. Каждый элемент множества D задается тремя числовыми значениями: парой (r, s) и соответствующим значением объема потока d_{rs} , который надо переслать по сети из вершины $r \in V_0$ (источник) к вершине $s \in V_0$ (сток). Значения объемов

d_{rs} заданы в тех же единицах, что и значения пропускных способностей дуг;

- (iii) задано множество T возможных повреждений сети $N(V, A)$. Повреждение $t \in T$ сети характеризуется набором коэффициентов $0 \leq \mu_{ijt} \leq 1$ для всех $(i, j) \in A$, где коэффициент μ_{ijt} указывает на то, что пропускная способность дуги (i, j) у сети при повреждении t уменьшится в $1/\mu_{ijt}$ раз. Для удобства описания математических моделей индекс $t = 0$ условимся считать нулевым повреждением сети $N(V, A)$, ему отвечает набор коэффициентов $\mu_{ij0} = 1$ для всех $(i, j) \in A$. Это означает, что „нулевое“ повреждение сети равносильно тому, что сеть $N(V, A)$ функционирует в режиме без повреждений.

Для обозначения мощности (размера) рассмотренных выше множеств будем использовать символ $|\cdot|$, т.е. $|N|$ – число вершин, а $|A|$ – число дуг в сети $N(V, A)$; $|T|$ – число повреждений в сети $N(V, A)$; $|D|$ – число пар вершин сети $N(V, A)$, для которых заданы объемы потоков, которые пересылаются.

Сделаем следующее предположение относительно данных (i)–(iii).

Предположение 1. Для ориентированной сети $N(V, A)$ все требования D по передаче объемов потока между парами вершин можно удовлетворить при неограниченных значениях пропускных способностей дуг этой сети $N(V, A)$.

Пусть $Y = \{y_{ij}, (i, j) \in A\}$ – множество неизвестных значений пропускных способностей дуг $(i, j) \in A$, которые нужно прибавить к уже существующим значениям пропускных способностей дуг $Y^0 = \{y_{ij}^0, (i, j) \in A\}$ сети, а x_{ijt}^{rs} – неизвестное значение той части объема потока d_{rs} , $(r, s) \in D$, который при t -м повреждении сети будет пропущен по дуге $(i, j) \in A$. Тогда математическую модель задачи нахождения оптимальных по суммарной стоимости значений Y для надежной ориентированной сети $N(V, A)$ можно сформулировать так: минимизировать линейную функцию

$$\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij} \quad (7.1)$$

при ограничениях

$$\sum_{(r,s) \in D} x_{ijt}^{rs} \leq \mu_{ijt}(y_{ij}^0 + y_{ij}), \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, \quad (7.2)$$

$$\sum_{j:(i,j) \in A} x_{ijt}^{rs} - \sum_{j:(j,i) \in A} x_{jit}^{rs} = \begin{cases} d_{rs}, & i = r, \\ 0, & i \neq r, s, \\ -d_{rs}, & i = s, \end{cases} \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, \quad (7.3)$$

$$x_{ijt}^{rs} \geq 0, \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, (r, s) \in D, \quad (7.4)$$

$$y_{ij} \geq 0, \quad (i, j) \in A. \quad (7.5)$$

Здесь минимизируемая функция (7.1) задает суммарные затраты по созданию тех пропускных способностей (дополняющих уже существующие) дуг, которые обеспечивают надежное функционирование сети $N(V, A)$.

Смысл ограничений (7.2)–(7.5) достаточно прозрачен. Так, ограничения (7.3) указывают на обязательное выполнение требований D по передаче объемов потока в сети $N(V, A)$ и должны быть удовлетворены как в отсутствие повреждений сети ($t = 0$), так и в каждом из случаев, когда произойдет только одно (но произвольное из множества T) повреждение сети. При каждом $t \in (0 \cup T)$ необходимо удовлетворить и ограничение вида (7.2). Они означают, что суммарный поток через дугу $(i, j) \in A$ не должен превысить пропускной способности этой дуги как при отсутствии повреждений, так и при каждом отдельном повреждении сети. Пропускная способность дуги $(i, j) \in A$ состоит из уже имеющейся (y_{ij}^0) и той неизвестной (y_{ij}) пропускной способности, которая добавляется. Ограничения (7.4) и (7.5) связаны с неотрицательностью переменных x_{ijt}^{rs} и y_{ij} , соответственно.

Отметим, что система ограничений (7.2)–(7.5) может быть несовместной, даже если выполняется предположение 1. Это может произойти из-за невозможности удовлетворить ограничения (7.2) при данной структуре повреждений сети. Для обеспечения совместности системы ограничений (7.2)–(7.5) введем дополнительные неотрицательные переменные $x_{ijt} \geq 0$, $(i, j) \in A$, $t \in (0 \cup T)$ и придадим им следующий смысл: x_{ijt} отвечает тому значению пропускной способности дуги $(i, j) \in A$, которого не хватает при t -м повреждении сети для выполнения ограничения вида (7.2), которые отвечают этим

$(i, j) \in A$ и $t \in (0 \cup T)$. Тогда аналог задачи (7.1)–(7.5) можно сформулировать в таком виде:

минимизировать линейную функцию

$$\sum_{t \in (0 \cup T)} \sum_{(i, j) \in A} Q_{ij} x_{ijt} + \sum_{(i, j) \in A} c_{ij} y_{ij} \quad (7.6)$$

при ограничениях

$$\sum_{(r, s) \in D} x_{ijr}^{rs} - x_{ijr} \leq \mu_{ijr}(y_{ij}^0 + y_{ij}), \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, \quad (7.7)$$

$$\sum_{j: (i, j) \in A} x_{ijr}^{rs} - \sum_{j: (j, i) \in A} x_{jir}^{rs} = \begin{cases} d_{rs}, & i = r, \\ 0, & i \neq r, s, \\ -d_{rs}, & i = s, \end{cases} \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, \quad (7.8)$$

$$x_{ijr}^{rs} \geq 0, \quad x_{ijr} \geq 0, \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, (r, s) \in D, \quad (7.9)$$

$$y_{ij} \geq 0, \quad (i, j) \in A, \quad (7.10)$$

где штрафные множители Q_{ij} выбраны такими, чтобы значения дополнительных переменных в оптимуме равнялись нулю, если система (7.2)–(7.5) совместна. Для этого достаточно выбрать значения $Q_{ij} > \sum_{(i, j) \in A} c_{ij}$.

Система ограничений (7.7)–(7.10) всегда будет совместной при выполнении предположения 1. При $Q_{ij} > \sum_{(i, j) \in A} c_{ij}$ дополнительные переменные в оптимуме будут принимать нулевые значения, если надежное функционирование сети $N(V, A)$ обеспечить можно. Если из-за структуры повреждений надежное функционирование сети $N(V, A)$ невозможно, то ненулевые оптимальные значения x_{ijr}^{*rs} будут характеризовать те критические места в сети $N(V, A)$, из-за которых невозможно ее надежное функционирование.

Задача (7.6)–(7.10) является задачей линейного программирования¹. Количество переменных для нее вычисляется по формуле

$$N_1 = |A| + |A| \times |D| \times (|T| + 1) + |A| \times (|T| + 1),$$

где первое слагаемое задает количество переменных y_{ij} , второе – количество переменных x_{ijr}^{rs} , а третье – количество переменных x_{ijr} , а количество ограни-

¹Отметим, что описанная задача нахождения оптимальных пропускных способностей дуг надежной сети может быть отнесена к задачам синтеза сети [152], [177, с. 248].

чений (без учета простейших на неотрицательность переменных) – по формуле

$$M_1 = (1 + |T|) \times |E| + (1 + |T|) \times |D| \times |V|,$$

где первое слагаемое задает полное количество ограничений (7.7), а второе – количество ограничений (7.8).

Задача (7.6)–(7.10) имеет большую размерность (большое количество переменных и ограничений) для сетей с количеством дуг порядка сотен и такого же порядка количеством повреждений сети. Например, при $|A| \sim 100$, $|D| \sim 100$, $|V| \sim 100$, $|T| \sim 1000$ количество переменных N_1 и ограничений M_1 имеет порядок 10^7 . В этом случае задачу (7.6)–(7.10) следует отнести к классу трудно решаемых. Однако, матрица ограничений (7.6)–(7.10) имеет блочную структуру, и это позволяет строить методы решения и для больших, чем приведены выше, размеров сети, например, при $|A| \sim 1000$.

Легко видеть, что переменные Y являются связывающими для всех повреждений сети в задаче (7.6)–(7.10). Поэтому для ее решения целесообразно использовать схему декомпозиции по переменным $Y = \{y_{ij}, (i, j) \in A\}$. При этом координирующая (внешняя) задача состоит в минимизации негладкой выпуклой функции $F(Y)$ от связывающих переменных Y , и для нахождения ее минимума можно использовать r -алгоритм.

Внутренняя подзадача, которую требуется решить для вычисления субградиентов функции $F(Y)$, связана с поиском оптимальных двойственных переменных к ограничениям (7.12) в задаче линейного программирования:

$$\sum_{(i,j) \in A} Q_{ij} x_{ij} \rightarrow \min, \quad (7.11)$$

$$\sum_{(r,s) \in D} x_{ij}^{rs} - x_{ij} \leq \mu_j (y_{ij}^0 + \bar{y}_{ij}), \quad (i, j) \in A, \quad (7.12)$$

$$\sum_{j:(i,j) \in A} x_{ij}^{rs} - \sum_{j:(j,i) \in A} x_{ji}^{rs} = \begin{cases} d_{rs}, & i = r; \\ 0, & i \neq r, s; \\ -d_{rs}, & i = s; \end{cases} \quad (r, s) \in D, \quad (7.13)$$

$$x_{ij}^{rs} \geq 0, \quad x_{ij} \geq 0, \quad (i, j) \in A, (r, s) \in D, \quad (7.14)$$

где \bar{y}_{ij} – известные (на момент текущей итерации внешнего алгоритма) значения пропускных способностей.

Чтобы вычислить субградиент функции $F(Y)$ внутреннюю подзадачу (7.11)–(7.14) придется решать $(1 + |T|)$ раз. Для ее решения можно использовать как схему декомпозиции по ограничениям с использованием r -алгоритма, так и стандартные программы решения задач линейного программирования (например, методы внутренних точек [12, 13, 190], которые позволяют учесть блочную структуру матрицы ограничений подзадачи). При использовании r -алгоритма требуется только подпрограмма нахождения кратчайших путей в ориентированной сети.

Задача нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети с передачей потоков по заданному множеству допустимых путей. Эта задача во многом близка к предыдущей, но способ передачи объемов потока из источников в стоки сети здесь другой. Если в предыдущей задаче для передачи объемов потока из источника в сток мог использоваться любой путь, который можно было построить в сети $N(V, A)$, то здесь можно использовать только те пути, которые принадлежат известному допустимому множеству путей между источником и стоком.

Здесь будет использована информация (i)–(iii) с таким дополнением:

(iv) задано множество допустимых путей в сети $P = \bigcup_{(r,s) \in D} P(r, s)$, где $P(r, s)$ – подмножество путей в сети $N(V, A)$, которые соединяют источник r со стоком s , $(r, s) \in D$, по которым (и только по ним) можно пересылать поток из вершины r к вершине s . Будем предполагать, что такие наборы путей даны для всех пар $(r, s) \in D$. Конкретный путь $P_k(r, s) \in P(r, s)$, т.е. путь с номером k для передачи объема потока с вершины r к вершине s , будем задавать вектором a_k^{rs} длины $|A|$, который состоит из нулей и единиц, где тем дугам сети $N(V, A)$, через которые проходит этот путь, отвечают единицы, а тем дугам, которые не входят в этот путь, отвечают нули. Отметим, что при хранении такого вектора достаточно использовать только список тех дуг сети, которые входят в

этот путь.

Мощность множества возможных путей будем обозначать $|P|$ (это количество заданных путей в сети $N(V, A)$), а $|P(r, s)|$ – количество заданных путей в сети $N(V, A)$, которые могут быть использованы для пересылки потока из источника r в сток s .

Предположение 2. Множество P содержит непустые подмножества $P(r, s)$ для всех пар $(r, s) \in D$.

Новую задачу нахождения для ориентированной сети $N(V, A)$ минимальных по суммарной стоимости пропускных способностей дуг $Y = \{y_{ij}, (i, j) \in A\}$, которые нужно прибавить к уже существующим (Y_0) , чтобы сеть $N(V, A)$ стала надежной, можно сформулировать таким образом:

минимизировать линейную функцию

$$\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij} \quad (7.15)$$

при ограничениях

$$\sum_{(r,s) \in D} \sum_{k \in P(r,s)} a_k^{rs} x_{kt}^{rs} \leq \mu_{ijt} (y_{ij}^0 + y_{ij}), \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, \quad (7.16)$$

$$\sum_{k \in P(r,s)} x_{kt}^{rs} = d_{rs}, \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, \quad (7.17)$$

$$x_{kt}^{rs} \geq 0, \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, k \in P(r, s), \quad (7.18)$$

$$y_{ij} \geq 0, \quad (i, j) \in A, \quad (7.19)$$

где x_{kt}^{rs} – неизвестное значение части объема потока d_{rs} , который будет пересылаться путем $k \in P(r, s)$ при t -м повреждении сети.

Система ограничений (7.16)–(7.19) аналогична системе ограничений (7.2)–(7.5). Отличие состоит в том, что в сети $N(V, A)$ требования D следует выполнять другим способом, при котором объем потока с источника r в сток s может быть переслан только по тем путям из r в s , которые заданы множеством $P(r, s)$. Эта особенность учитывается с помощью переменной x_{kt}^{rs} , которая имеет другой смысл, чем переменная x_{ijt}^{rs} в предыдущей задаче.

Система ограничений (7.16)–(7.19) может быть несовместной при выполнении предположения 2. Это может случиться из-за невозможности выполнить ограничения (7.16) при существующей структуре повреждений сети. Чтобы обеспечить совместность этой системы ограничений будем использовать дополнительные переменные $x_{ijt} \geq 0$, $(i, j) \in A$, $t \in (0 \cup T)$, которые имеют такой же смысл, как и в предыдущей задаче. Тогда аналог задачи (7.16)–(7.19) можно сформулировать в таком виде:

минимизировать линейную функцию

$$\sum_{t \in (0 \cup T)} \sum_{(i, j) \in A} Q_{ij} x_{ijt} + \sum_{(i, j) \in A} c_{ij} y_{ij} \quad (7.20)$$

при ограничениях

$$\sum_{(r, s) \in D} \sum_{k \in P(r, s)} a_k^{rs} x_{kt}^{rs} - x_{ijt} \leq \mu_{ijt} (y_{ij}^0 + y_{ij}), \quad t \in (0 \cup T), (i, j) \in A, \quad (7.21)$$

$$\sum_{k \in P(r, s)} x_{kt}^{rs} = d_{rs}, \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, \quad (7.22)$$

$$x_{kt}^{rs} \geq 0, x_{ijt} \geq 0, \quad t \in (0 \cup T), (r, s) \in D, k \in P(r, s), \quad (7.23)$$

$$y_{ij} \geq 0, \quad (i, j) \in A, \quad (7.24)$$

где x_{ijt} и Q_{ij} – дополнительные переменные и соответствующие штрафные множители, которые имеют такой же смысл, как и раньше. Достаточно выбрать штрафные множители Q_{ij} большими, чем $\sum_{(i, j) \in A} c_{ij}$, чтобы дополнительные переменные в оптимуме равнялись нулю, если система (7.16)–(7.19) совместна.

Система ограничений (7.21)–(7.24) всегда будет совместной, если выполнены предположения 1 и 2. При $Q_{ij} > \sum_{(i, j) \in A} c_{ij}$ оптимальные значения дополнительных переменных будут равны нулю, если можно обеспечить надежное функционирование сети $N(V, A)$. Если же из-за структуры повреждений сети это обеспечить невозможно, то ненулевые оптимальные значения переменных x_{ijt}^* будут характеризовать те „критичные“ дуги сети $N(V, A)$, из-за которых невозможно обеспечить надежное функционирование сети.

Задача (7.20)–(7.24) является задачей линейного программирования, и для сетей с величинами $|A|$, $|T|$ и $|P|$ порядка сотен имеет большую размерность. Матрица ограничений в ней характеризуется аналогичной блочной структурой, как и в задаче (7.15)–(7.19). Для решения задачи (7.20)–(7.24) будем использовать схему декомпозиции по связывающим переменным $Y = \{y_{ij}, (i, j) \in A\}$. Координующей (внешней) задачей является задача минимизации негладкой выпуклой функции $F(Y)$ от переменных Y , для ее решения можно использовать r -алгоритм.

Чтобы вычислить субградиент функции $F(Y)$, требуется $(|T| + 1)$ раз решить подзадачу – найти оптимальные двойственные переменные к ограничениям (7.26) для такой задачи линейного программирования:

минимизировать линейную функцию

$$\sum_{(i,j) \in A} Q_{ij} y_{ij} \quad (7.25)$$

при ограничениях

$$\sum_{(r,s) \in D} \sum_{k \in P(r,s)} a_k^{rs} x_k^{rs} - x_{ij} \leq \mu_{ij} (y_{ij}^0 + \bar{y}_{ij}), \quad (i, j) \in A, \quad (7.26)$$

$$\sum_{k \in P(r,s)} x_k^{rs} = d_{rs}, \quad (r, s) \in D, \quad (7.27)$$

$$x_k^{rs} \geq 0, \quad x_{ij} \geq 0, \quad (r, s) \in D, k \in P(r, s), \quad (7.28)$$

где \bar{y}_{ij} – известные значения пропускных способностей. Эта подзадача проще, чем соответствующая подзадача для первой задачи. Для ее решения можно использовать r -алгоритм в комбинации со схемой декомпозиции по ограничениям.

Программы ModelA и ModelC и их тестирование. Для нахождения минимальных по суммарной стоимости пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети разработано две программы: программа ModelA для задачи (7.6)–(7.10) и программа ModelC для задачи (7.20)–(7.24) (язык программирования ФОРТРАН). Алгоритмы решения обеих задач используют вложенные друг в друга две схемы декомпозиции: внешней является схема

декомпозиции по переменным – неизвестным значениям пропускных способностей дуг ориентированной сети; внутренние подзадачи (по каждому повреждению сети) решаются с помощью декомпозиции по ограничениям при фиксированных значениях пропускных способностей дуг. Схеме декомпозиции по переменным отвечает координирующая задача минимизации негладкой выпуклой функции, а схеме декомпозиции по ограничениям – задача максимизации негладкой вогнутой функции. Обе задачи негладкой оптимизации решаются с помощью r -алгоритма с адаптивной регулировкой шага.

В результате работы программ ModelA и ModelC получаем такие параметры надежной ориентированной сети $N(V, A)$:

- минимальные по суммарной стоимости пропускные способности дуг сети $N(V, A)$, которые дополняют уже существующие, т.е. для каждой дуги $(i, j) \in A$ находятся y_{ij}^* – ресурс пропускной способности дуги (i, j) , который дополняет уже существующее значение пропускной способности этой дуги y_{ij}^0 ;
- достаточное условие того, что выполнить все требования на передачу объемов потока невозможно. Это может случиться по двум причинам: а) структура сети $N(V, A)$ такова, что выполнить требования по потокам невозможно; б) структура повреждений в сети $N(V, A)$ такова, что выполнить требования по потокам невозможно.

Достаточным условием невыполнения всех требований на передачу объемов потоков в сети является неравенство $\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij}^* < F^*$, где F^* – оптимальное значение функции (7.6) или функции (7.20). Неравенство означает, что оптимальное значение целевой функции больше, чем минимальные по стоимости найденные пропускные способности дуг ориентированной сети. Это имеет место только тогда, когда в F^* вносит ненулевой вклад штрафная часть целевой функции

$$\sum_{t=0}^{|T|} \sum_{(i,j) \in A} Q_{ijt} x_{ijt}^*,$$

где штрафные коэффициенты выбираются одинаковыми:

$$Q_{ijt} = \sum_{(i,j) \in A} c_{ij} + 1.$$

Общая структура программы ModelA подробно описана в книге [26].

Тестирование программ ModelA и ModelC проведено на примере ориентированной сети Net(6,16) с шестью вершинами и 16 дугами (рис. 7.1).

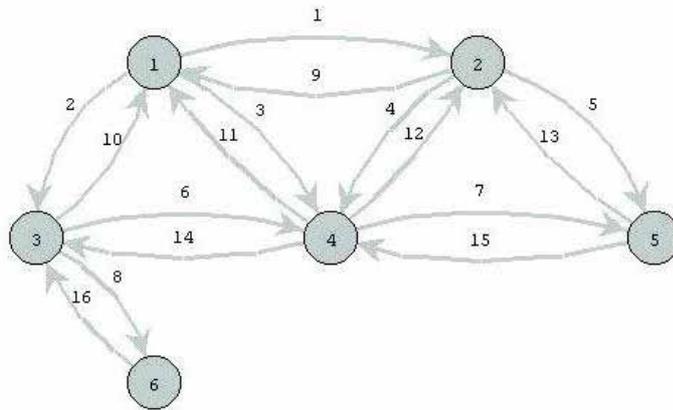


Рис. 7.1. Структура сети Net(6,16)

Стоимости создания единицы пропускной способности для дуг (1,2) и (2,1) возьмем равными 1,5, а для всех других – 1. Будем считать, что между всеми парами вершин требуется переслать по сети один и тот же объем потока, равный десяти единицам. Таким образом, множество $D = \{1, \dots, 30\}$ состоит со всех возможных троек $(r, s, 10)$, где $s = 1, \dots, 6$, $r = 1, \dots, 6$, $s \neq r$. Для сети Net(6,16) рассмотрим такие варианты множеств $T = \{1, \dots, |T|\}$ возможных повреждений:

- а) отсутствие повреждений ($|T| = 0$);
- б) отказ произвольной, но только одной дуги, за исключением дуг, связанных с вершиной 6 ($|T| = 14$). Отметим, что в случае отказа одной из дуг (3,6) либо (6,3) невозможно будет требования на передачу потоков в сети;
- в) всего одно повреждение ($|T| = 1$), когда одновременно отказывают четыре дуги: (1,2), (2,1), (2,4) и (4,2);

- г) структура повреждений сети такова, что из входящих в каждую вершину дуг остается функционирующей только одна дуга, а остальные входные дуги могут отказывать ($|T| = 14$);
- д) построен по аналогии с вариантом г), где аналогичные отказы имеют место как для входных у вершину дуг, так и для выходных из этой вершины дуг ($|T| = 28$);
- е) произвольная дуга, но только одна, уменьшает свою пропускную способность в два раза ($|T| = 16$).

Минимальные по суммарной стоимости пропускные способности дуг сети $\text{Net}(6,16)$ для вариантов а)–е) приведены в табл. 7.1 и 7.2. Они получены программой ModelA соответственно при нулевых значениях y_{ij}^0 (табл. 7.1) и ненулевых значениях y_{ij}^0 (табл. 7.2).

Таблица 7.1. Оптимальные пропускные способности дуг сети $\text{Net}(6,16)$ при повреждениях а)–е) и нулевых значениях y_{ij}^0

N	(i, j)	c_{ij}	y_{ij}^0	y_{ij}^*					
				a	b	v	z	d	e
1	(1,2)	1,5	0	10	50	0	90	90	49,14
2	(1,3)	1,0	0	20	80	20	90	90	53,33
3	(1,4)	1,0	0	20	40	30	50	50	14,18
4	(2,4)	1,0	0	30	30	0	50	50	13,73
5	(2,5)	1,0	0	10	50	50	80	80	25,43
6	(3,4)	1,0	0	60	80	60	80	90	53,37
7	(4,5)	1,0	0	40	50	80	80	80	49,14
8	(3,6)	1,0	0	50	50	50	50	50	100,00
9	(2,1)	1,5	0	10	50	0	80	90	44,19
10	(3,1)	1,0	0	20	80	20	80	90	53,32
11	(4,1)	1,0	0	20	40	30	50	50	19,14
12	(4,2)	1,0	0	30	30	0	50	50	6,29
13	(5,2)	1,0	0	10	50	50	50	80	27,91
14	(4,3)	1,0	0	60	80	60	90	90	53,34
15	(5,4)	1,0	0	40	50	80	50	80	44,18
16	(6,3)	1,0	0	50	50	50	50	50	100,00
$\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij}^*$				490	910	580	1155	1250	753,4

В табл. 7.2 рассмотренные варианты приведены в том же порядке, что и в табл. 7.1. Исключением есть то, что в табл. 7.2 отсутствует вариант а). Это связано с тем, что расчеты в табл. 7.2 учитывают, что y_{ij}^0 равно значению $y_{ij}^*(a)$ из табл. 7.1. Поэтому, тривиальное решение для варианта а), которое равно нулевому вектору, в табл. 7.2 не приведено.

Таблица 7.2. Оптимальные пропускные способности дуг сети Net(6,16) при повреждениях а)–е) и ненулевых значениях y_{ij}^0

N	(i, j)	c_{ij}	y_{ij}^0	y_{ij}^*				
				b	v	z	d	e
1	(1,2)	1,5	10	40	0	80	80	20,00
2	(1,3)	1,0	20	60	0	70	70	20,43
3	(1,4)	1,0	20	20	10	30	30	1,51
4	(2,4)	1,0	30	0	0	20	20	0,00
5	(2,5)	1,0	10	40	40	70	70	20,00
6	(3,4)	1,0	60	20	0	20	30	16,98
7	(4,5)	1,0	40	10	40	40	40	0,00
8	(3,6)	1,0	50	0	0	0	0	50,00
9	(2,1)	1,5	10	40	0	70	80	20,00
10	(3,1)	1,0	20	60	0	60	70	21,51
11	(4,1)	1,0	20	20	10	30	30	0,43
12	(4,2)	1,0	30	0	0	20	20	0,00
13	(5,2)	1,0	10	40	40	40	70	20,00
14	(4,3)	1,0	60	20	0	30	30	19,14
15	(5,4)	1,0	40	10	40	10	40	0,00
16	(6,3)	1,0	50	0	0	0	0	50,00
$\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij}^*$				420	180	665	760	280,00

Из табл. 7.1 и 7.2 видно, чем сложнее структура повреждений сети, тем большими будут значения пропускных способностей дуг, чтобы можно было удовлетворить все требования на передачу потоков в сети, как при отсутствии повреждений, так и в том случае, если будет иметь место одно и только одно, но произвольное из заданного списка повреждение ориентированной сети. Так, например, затраты на увеличение пропускных способностей дуг

для обеспечения надежности сети Net(6,16) при варианте д) будут почти в два с половиной раза больше, чем тогда, когда повреждений в сети Net(6,16) нет (1250 единиц против 490 единиц).

Тестирование программы ModelC проводилось на тех же данных, что и тестирование программы ModelA. Очевидно, что если рассмотреть все возможные пути для передачи потоков в сети Net(6,16) между всеми парами вершин, то для всех вариантов а)–е) мы должны получить те же значения оптимальных пропускных способностей, которые приведены в табл. 7.1 и 7.2. Именно это подтвердили расчеты для программы ModelC, когда рассматривались все возможные пути (их количество равно $|P| = 140$).

Второй вариант тестовых расчетов для ModelC проводился для случая, когда количество путей для передачи потоков было ограничено: между каждой парой вершин выбирались только два пути, которые не пересекались по дугам (за исключением дуг, связанных с вершиной 6). Этот набор разрешенных путей для передачи потоков между парами вершин в сети Net(6,16) задавался следующим образом:

$$\begin{aligned} & (1 \rightarrow 2) - (1,2), (1,4,2); (1 \rightarrow 3) - (1,3), (1,4,3); (1 \rightarrow 4) - (1,4), (1,2,4); \\ & (1 \rightarrow 5) - (1,2,5), (1,4,5); (1 \rightarrow 6) - (1,3,6), (1,4,3,6); (2 \rightarrow 3) - (2,1,3), (2,4,3); \\ & (2 \rightarrow 4) - (2,4), (2,1,4); (2 \rightarrow 5) - (2,5), (2,4,5); (2 \rightarrow 6) - (2,1,3,6), (2,4,3,6); \\ & (3 \rightarrow 4) - (3,4), (3,1,4); (3 \rightarrow 5) - (3,4,5), (3,1,2,5); (3 \rightarrow 6) - (3,6); \\ & (4 \rightarrow 5) - (4,5), (4,2,5); (4 \rightarrow 6) - (4,3,6), (4,1,3,6); (5 \rightarrow 6) - (5,4,3,6), (5,2,1,3,6). \end{aligned}$$

Путь $(i \rightarrow j)$ из вершины i в вершину j выбирался (по вершинам) обратным направлением пути $(j \rightarrow i)$.

Минимальные по стоимости пропускные способности сети Net(6,16), полученные программой ModelC, приведены в табл. 7.3. Здесь рассмотрены только варианты а), б), е) при нулевом векторе y_{ij}^0 и варианты б), е) при ненулевом векторе y_{ij}^0 ($y_{ij}^0 = y_{ij}^*(a)$). Для всех других вариантов обеспечить надежность сети Net(6,16) невозможно из-за структуры повреждений в сети.

Из табл. 7.3 видим, что в большинстве случаев минимальные затраты на пропускные способности дуг для обеспечения надежности сети Net(6,16)

больше, чем для задачи (7.6)–(7.10). Так, это имеет место для всех рассмотренных вариантов, кроме варианта е) при ненулевых значениях имеющегося в наличии ресурса пропускной способности дуг, и обусловлено тем, что рассматривается ограниченное число путей для передачи потоков в сети Net(6,16).

Таблица 7.3. Оптимальные пропускные способности дуг сети Net(6,16) при ограниченном наборе путей для передачи потоков

N	(i, j)	c_{ij}	y_{ij}^0	y_{ij}^*			y_{ij}^0	y_{ij}^*	
				а	б	е		б	е
1	(1,2)	1,5	0	10	40	41,34	10	30	20,00
2	(1,3)	1,0	0	20	80	52,21	20	60	29,28
3	(1,4)	1,0	0	20	50	20,71	20	30	2,34
4	(2,4)	1,0	0	30	40	19,40	30	10	0,00
5	(2,5)	1,0	0	10	50	30,00	10	40	20,00
6	(3,4)	1,0	0	60	80	55,90	60	20	15,32
7	(4,5)	1,0	0	40	50	40,00	40	10	0,00
8	(3,6)	1,0	0	50	50	100,00	50	0	150,00
9	(2,1)	1,5	0	10	40	41,21	10	30	20,00
10	(3,1)	1,0	0	20	80	52,05	20	60	22,34
11	(4,1)	1,0	0	20	50	21,00	20	30	9,28
12	(4,2)	1,0	0	30	40	19,33	30	10	0,00
13	(5,2)	1,0	0	10	50	30,00	10	40	20,00
14	(4,3)	1,0	0	60	80	55,58	60	20	1,43
15	(5,4)	1,0	0	40	50	40,00	40	10	0,00
16	(6,3)	1,0	0	50	50	100,00	50	0	150,00
$\sum_{(i,j) \in A} c_{ij} y_{ij}^*$				490	920	760,00		430	280,00

Задаче (7.6)–(7.10) и задаче (7.20)–(7.24) соответствуют задачи линейного программирования со своим числом переменных N и числом ограничений M . Для задачи (7.6)–(7.10) они определяются по формулам

$$N_a = |A| \times (|T| + 2) + |A| \times |D| \times (|T| + 1),$$

$$M_a = (|T| + 2) \times (|A| + |D| \times |V|),$$

а для задачи (7.20)–(7.24) – по формулам

$$N_c = |A| \times (|T| + 2) + |P| \times (|T| + 1),$$

$$M_c = (|T| + 1) \times (|A| + |D|).$$

В табл. 7.4 приведены характеристики работы программ ModelA и ModelC для задач линейного программирования, которые отвечают вариантам а)–е) в сети Net(6,16) при нулевых y_{ij}^0 . Для задачи (7.20)–(7.24) рассматривались все возможные пути для передачи потоков между всеми парами вершин сети Net(6,16). Поэтому оптимальные значения целевой функции для задач (7.6)–(7.10) и задач (7.20)–(7.24) совпадали. Здесь iter – количество итераций r -алгоритма с адаптивной регулировкой шага для решения координирующей задачи негладкой минимизации в схеме декомпозиции по переменным; time – время решения задач программами ModelA и ModelC на IBM PC/Pentium 750 МГц. Приведены также размеры задач линейного программирования (количество переменных и количество ограничений), соответствующие вариантам а)–е).

Таблица 7.4. Характеристики работы программ ModelA и ModelC

Вариант	ModelA				ModelC			
	N_a	M_a	iter	time, с	N_c	M_c	iter	time, с
а)	512	392	152	10	172	46	151	6
б)	7456	3136	224	110	2356	690	206	94
в)	1008	588	139	17	328	92	165	12
г)	7456	3136	139	15	2356	690	178	66
д)	14400	5880	274	45	4540	1334	158	102
е)	8448	3528	159	111	2668	782	188	99

Задачи линейного программирования для вариантов а)–е) в сети Net(6,16) имеют относительно небольшие размеры и могут быть решены с помощью стандартных ЛП-программ, например CPLEX, MINOS и др. С увеличением размеров сети существенно растут и размеры соответствующих задач линейного программирования. Для таких задач программы ModelA и ModelC мо-

гут оказаться более быстрыми, чем стандартные ЛП-программы. Так, задача (7.6)–(7.10) для надежной ориентированной сети с 15 вершинами и 30 дугами, которой отвечает задача линейного программирования с числом переменных $N = 196260$ и числом ограничений $N = 101760$, была решена с помощью с помощью программы ModelA за 58 минут на IBM PC/Pentium 750 МГц.

7.2 Задачи оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий

Рассмотрены две задачи для нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий, которые сформулированы как многоэкстремальные задачи нелинейного программирования со сложным видом целевой функции. Обсуждаются вопросы нахождения локальных экстремумов этих задач с помощью методов первого порядка и анализируются способы вычисления градиента целевой функции в зависимости от количества слоев в оптическом покрытии.

Основные обозначения. Пусть некоторое плоское многослойное оптическое покрытие (МОП) состоит из N плоских однородных слоев. Каждый k -й слой ($k = 1, 2, \dots, N$) характеризуется значениями коэффициента преломления n_k и геометрической толщины d_k . Обозначим параметры МОП:

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \vdots \\ n_N \end{pmatrix}, \quad \vec{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_N \end{pmatrix},$$

где \vec{n} – вектор значений коэффициентов преломления плоских слоев ($n_k, k = 1, \dots, N$), а \vec{d} – вектор значений геометрических толщин этих же слоев ($d_k, k = 1, \dots, N$).

Пусть электромагнитная волна длины λ падает перпендикулярно поверхности МОП, и ее энергия не теряется при прохождении через МОП. Характеристическая матрица для МОП равна произведению характеристических

матриц всех N плоских слоев, т.е.

$$M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) = \prod_{k=1}^N M(n_k, d_k, \lambda), \quad (7.29)$$

где $M(n_k, d_k, \lambda)$ – характеристическая 2×2 -матрица k -го слоя ($k = 1, \dots, N$) и имеет следующий вид:

$$M(n_k, d_k, \lambda) = \left\| \begin{array}{cc} \cos\left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda}\right) & -\frac{i}{n_k} \sin\left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda}\right) \\ -in_k \sin\left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda}\right) & \cos\left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda}\right) \end{array} \right\|. \quad (7.30)$$

Здесь i – мнимая единица.

Формула (7.29) лежит в основе метода Абелле для расчета параметров оптической многослойной структуры (прямая задача) [172]. Она дает возможность рассчитать характеристическую матрицу для МОП, зная характеристические матрицы для всех плоских однородных слоев, из которых состоит эта МОП. В результате расчета по формуле (7.29) будет получена характеристическая матрица $M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)$ следующего вида:

$$M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) = \left\| \begin{array}{cc} m_{11}(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) & im_{12}(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) \\ im_{21}(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) & m_{22}(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) \end{array} \right\| \equiv \left\| \begin{array}{cc} m_{11} & im_{12} \\ im_{21} & m_{22} \end{array} \right\|.$$

Отметим, что характеристические матрицы вида (7.30) удовлетворяют условию:

$$\det(M(n_k, d_k, \lambda)) = 1, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

что гарантирует выполнение такого же условия для характеристической матрицы МОП, т.е.

$$\det(M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)) = 1.$$

Данное свойство имеет простой физический смысл. Оно означает, что если электромагнитная волна распространяется в N непоглощающих ее энергию средах, то любая комбинированная (из этих N сред) среда также не будет поглощать энергию электромагнитной волны.

Коэффициент пропускания энергии электромагнитной волны длины λ через МОП зависит от коэффициентов характеристической матрицы $M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)$

и имеет следующий вид:

$$T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) = \frac{4}{2 + \frac{n_0}{n_s} m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0} m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21}^2} \quad (7.31)$$

где n_0 и n_s – показатели преломления внешней среды и подкладки соответственно. Коэффициент $T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)$, вычисленный по формуле (7.31), означает, что проходящая через МОП (имеющая снизу подкладку с показателем преломления n_s) энергия электромагнитной волны длины λ будет равна

$$E(\lambda) = T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) * E_0(\lambda),$$

где $E_0(\lambda)$ – энергия падающей на МОП (перпендикулярно к ее поверхности) электромагнитной волны из внешней среды с показателем преломления n_0 .

Следовательно, зная для МОП параметры \vec{n} и \vec{d} , мы можем по формуле (7.31) рассчитать коэффициент пропускания энергии электромагнитной волны $T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)$ при заданной длине волны λ , который гарантируется на выходе из МОП. Оптимизационные задачи, которые рассмотрим ниже, будут предназначены для решения обратных задач: для заданной структуры МОП будут подбираться такие ее параметры \vec{n} и \vec{d} , чтобы на выходе из МОП наилучшим образом обеспечивались заданные коэффициенты пропускания излучения для некоторого дискретного спектра.

Две задачи оптимизации параметров МОП. Пусть задан дискретный спектр длин волн λ_j , $j = 1, \dots, L$, и соответствующие этим длинам волн коэффициенты пропускания излучения: T_j , $j = 1, \dots, L$, которые требуется обеспечить на выходе из МОП. Параметры внешней оболочки для МОП, т.е. n_0 – показатель преломления внешней среды и n_s – показатель преломления подкладки считаются фиксированными. Пусть \vec{n}^* – вектор оптимальных значений коэффициентов преломления для МОП, а \vec{d}^* – вектор оптимальных значений геометрических толщин.

Первая оптимизационная задача (задача А) связана с нахождением таких параметров \vec{n}^* и \vec{d}^* , которые для заданного спектра длин волн позволяют обеспечить оптимальные (по критерию наилучшего среднеквадратичного отклонения) коэффициенты прохождения излучения через МОП при двусто-

ронных ограничениях на значения параметров \vec{n}^* и \vec{d}^* . Оптимальные параметры \vec{n}^* и \vec{d}^* находятся посредством решения следующей задачи нелинейного программирования:

$$\min_{\vec{n}, \vec{d} \in R^N} \left\{ F(\vec{n}, \vec{d}) = \sum_{j=1}^L \left(T_j - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j) \right)^2 \right\} \quad (7.32)$$

при ограничениях:

$$\vec{n}_{low} \leq \vec{n} \leq \vec{n}_{up}, \quad (7.33)$$

$$\vec{d}_{low} \leq \vec{d} \leq \vec{d}_{up}. \quad (7.34)$$

Здесь \vec{n}_{low} и \vec{n}_{up} – векторы нижних и верхних границ (соответственно) на коэффициенты преломления слоев; \vec{d}_{low} и \vec{d}_{up} – векторы нижних и верхних границ (соответственно) на геометрические толщины плоских слоев.

Вторая оптимизационная задача (задача В) связана с нахождением оптимальных параметров \vec{n}^* и \vec{d}^* при заданной геометрической толщине МОП и двусторонних ограничениях на неизвестные параметры \vec{n}^* . Задача В формулируется как следующая задача нелинейного программирования:

$$\min_{\vec{n}, \vec{d} \in R^N} \left\{ F(\vec{n}, \vec{d}) = \sum_{j=1}^L \left(T_j - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j) \right)^2 \right\} \quad (7.35)$$

при ограничениях:

$$\vec{n}_{low} \leq \vec{n} \leq \vec{n}_{up} \quad (7.36)$$

$$\sum_{k=1}^N d_k = d_{total} \quad (7.37)$$

$$d_k \geq 0, \quad k = 1, \dots, N, \quad (7.38)$$

где d_{total} – суммарная геометрическая толщина МОП. Целевая функция для задачи В такая же, как и для задачи А, но используется другая система ограничений, которая требует выдержать заданную геометрическую толщину МОП при двусторонних ограничениях на неизвестные коэффициенты преломления \vec{n}^* .

С помощью задачи В можно изучать влияние неоднородности показателя преломления с помощью представления неоднородной структуры как некоторого набора однородных слоев. Так, например, рассматривая неоднородную

оптическую структуру как многослойную структуру с заданными значениями коэффициентов преломления для каждого однородного слоя, можно найти „оптимальные“ значения толщин этих слоев при ограничении на их суммарную геометрическую толщину. Найденное решение может помочь при исследовании тех неизвестных законов (например, ступенчатый, линейный или экспоненциальный) [172], по которым изменяются коэффициенты преломления неоднородных оптических покрытий в направлении, перпендикулярном границам слоев.

Задачи А и В являются многоэкстремальными задачами нелинейного программирования с количеством переменных $2N$. Их характеризуют сложная функция цели и достаточно простые системы ограничений. Для нахождения локальных экстремумов оптимизационных задач А и В можно использовать методы первого порядка, т.е. методы, в которых используются вычисленные в точках итерационного процесса значения функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ и ее градиента. В качестве таковых можно использовать различные градиентные и субградиентные методы [130, 121, 39, 162]. Так, например, в [172, 36] эффективными методами при решении подобных задач указываются методы из семейства квазиньютоновских методов и сопряженных направлений [10, 121].

Однако, для нахождения локальных экстремумов задач А и В целесообразнее использовать эффективные варианты субградиентных методов с растяжением пространства (например, r -алгоритмы) [130, 198]. В пользу этого можно привести два довода. Во-первых, применение r -алгоритмов позволяет избежать использования негладких штрафных функций для учета ограничений (7.33)–(7.34) и (7.36)–(7.38). Во-вторых, при использовании r -алгоритмов легко расширить класс критериев оптимальности для параметров \vec{n}^* и \vec{d}^* в задачах А и В. Так, например, заменив функцию $F(\vec{n}, \vec{d})$ на

$$F_1(\vec{n}, \vec{d}) = \sum_{j=1}^L \left| T_j - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j) \right|,$$

где $|\cdot|$ – модуль (абсолютная величина) числа, получим наилучшие значения \vec{n}^* и \vec{d}^* согласно критерию наименьших модулей. Чтобы выбрать наилучшие

параметры согласно минимаксному чебышевскому критерию, достаточно заменить $F(\vec{n}, \vec{d})$ на

$$F_2(\vec{n}, \vec{d}) = \max_{j=1, \dots, L} \left| T_j - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j) \right|.$$

Две последних функции – негладкие, и для работы с ними требуются именно субградиентные методы.

Использование градиентного (субградиентного) метода подразумевает наличие некоторой процедуры (оракула), которая вычисляет значение функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ и ее градиента (субградиентов функций $F_1(\vec{n}, \vec{d})$ и $F_2(\vec{n}, \vec{d})$) в заданной точке. Основные вычислительные затраты при подготовке оракула для задач А и В связаны с вычислением градиентов функций $T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)$ для всех $j = 1, 2, \dots, L$.

Эффективное построение оракула (по количеству вычислений) будет определять скорость работы того или иного выбранного метода первого порядка. Поэтому ниже будут рассмотрены и проанализированы два способа (конечно-разностный и аналитический) для вычисления градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ и будет проведен анализ компьютерных реализаций обоих способов в зависимости от количества слоев N . Оба обсуждаемых способа можно также использовать и для расчета субградиентов негладких функций $F_1(\vec{n}, \vec{d})$ и $F_2(\vec{n}, \vec{d})$.

Способы вычисления градиента $F(\vec{n}, \vec{d})$. Проанализируем два способа вычисления градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$: (i) конечно-разностный и (ii) аналитический способы. При этом отметим как недостатки, так и преимущества обоих способов. Компоненты вектор-градиента $\nabla F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$, вычисленного в точке (\vec{n}_k, \vec{d}_k) , условимся обозначать $\nabla_i F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$, $i = 1, \dots, 2N$. Для упрощения обозначений индекс k будем опускать там, где это не приводит к недоразумению.

Конечно-разностный способ. Пусть \vec{e}_i – N -мерный вектор, i -ая компонента которого равна единице, а все остальные компоненты равны нулю. Зададим достаточно малые величины Δn_i и Δd_i , $i = 1, \dots, N$. Тогда компоненты градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ в точке (\vec{n}, \vec{d}) рассчитываются по следующему

щим формулам:

$$\begin{aligned}\nabla_i F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) &= \frac{F(\vec{n}_k + \Delta n_i \vec{e}_i, \vec{d}_k) - F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)}{\Delta n_i}, i = 1, \dots, N, \\ \nabla_{N+i} F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) &= \frac{F(\vec{n}_k, \vec{d}_k + \Delta d_i \vec{e}_i) - F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)}{\Delta d_i}, i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

Хотя это и самый простой для реализации способ вычисления $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$, он обладает двумя существенными недостатками:

- I) разномасштабность параметров \vec{n} и \vec{d} (в реальных задачах коэффициенты преломления составляют несколько единиц, а геометрические толщины порядка нескольких сотен нанометров (10^{-9} м.)) требует достаточно аккуратного обращения с величинами Δn_i и Δd_i , $i = 1, \dots, N$, при построении правил останова итерационного процесса;
- II) точность нахождения локального экстремума существенно зависит от используемых значений Δn_i и Δd_i , $i = 1, \dots, N$. Это означает, что попытки найти оптимальные параметры \vec{n}^* и \vec{d}^* с точностью близкой к той точности, с которой вычисляются градиенты в точках, заранее обречены на неудачу. Более того, попытка осуществить такой расчет будет характеризоваться расходимостью субградиентного процесса в окрестности локального экстремума, и связано это будет с тем, что из-за достаточно грубого вычисления градиента выбираются неправильные направления движения для субградиентного процесса.

Аналитический способ. Аналитический способ вычисления градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ свободен от недостатков, свойственных конечно-разностному способу. Он состоит в следующем. Непосредственное дифференцирование функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ дает следующие формулы для вычисления компонент ее градиента в точке (\vec{n}_k, \vec{d}_k) :

$$\begin{aligned}\nabla_i F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) &= 2 \sum_{j=1}^L \left(T_j - T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) \right) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial n_i}, i = 1, \dots, N, \\ \nabla_{N+i} F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) &= 2 \sum_{j=1}^L \left(T_j - T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) \right) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial d_i}, i = 1, \dots, N.\end{aligned}$$

Следовательно, для аналитического вычисления $\nabla F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$ достаточно для всех $i = 1, \dots, N$ уметь находить аналитические выражения для производ-

ных $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ и $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ при фиксированном значении λ . С помощью (7.31) эти производные легко найти для каждого i ($1 \leq i \leq N$) по следующему правилу:

$$\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} = \frac{8 \left(\frac{n_0}{n_s} m_{11} \frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} + \frac{n_s}{n_0} m_{22} \frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} + n_0 n_s m_{12} \frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21} \frac{\partial m_{21}}{\partial n_i} \right)}{\left(2 + \frac{n_0}{n_s} m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0} m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21}^2 \right)^2},$$

$$\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i} = \frac{8 \left(\frac{n_0}{n_s} m_{11} \frac{\partial m_{11}}{\partial d_i} + \frac{n_s}{n_0} m_{22} \frac{\partial m_{22}}{\partial d_i} + n_0 n_s m_{12} \frac{\partial m_{12}}{\partial d_i} + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21} \frac{\partial m_{21}}{\partial d_i} \right)}{\left(2 + \frac{n_0}{n_s} m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0} m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21}^2 \right)^2},$$

где $\frac{\partial m_{11}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{12}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{21}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{22}}{\partial n_i}$, $\frac{\partial m_{11}}{\partial d_i}$, $\frac{\partial m_{12}}{\partial d_i}$, $\frac{\partial m_{21}}{\partial d_i}$ и $\frac{\partial m_{22}}{\partial d_i}$ – коэффициенты следующих 2×2 -матриц:

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} = \begin{vmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} & i \frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} \\ i \frac{\partial m_{21}}{\partial n_i} & \frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} \end{vmatrix}; \quad \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i} = \begin{vmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial d_i} & i \frac{\partial m_{12}}{\partial d_i} \\ i \frac{\partial m_{21}}{\partial d_i} & \frac{\partial m_{22}}{\partial d_i} \end{vmatrix}.$$

Матрицы $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ и $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ легко рассчитать, используя соотношения (7.29) и (7.30). Так, например, матрицы $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ рассчитываются с помощью следующих соотношений:

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_1} = \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda)}{\partial d_1} \prod_{k=2}^N M(n_k, d_k, \lambda),$$

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i} = \prod_{k=1}^{i-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial d_i} \prod_{k=i+1}^N M(n_k, d_k, \lambda), \quad i=2, \dots, N-1, \quad (7.39)$$

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_N} = \prod_{k=1}^{N-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda)}{\partial d_N},$$

где 2×2 -матрицы $\frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial d_i}$ для каждого $i = 1, \dots, N$ имеют следующий вид:

$$\frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial d_i} = \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial d_k} \left(\cos \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & -i \frac{\partial}{\partial d_k} \left(\frac{1}{n_k} \sin \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \\ -i \frac{\partial}{\partial d_k} \left(n_k \sin \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & \frac{\partial}{\partial d_k} \left(\cos \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \end{vmatrix} =$$

$$= \begin{vmatrix} -\frac{2\pi n_i}{\lambda_j} \sin \left(\frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) & -\frac{i}{n_i} \frac{2\pi n_i}{\lambda_j} \cos \left(\frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) \\ -i n_i \frac{2\pi n_i}{\lambda_j} \cos \left(\frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) & -\frac{2\pi n_i}{\lambda_j} \sin \left(\frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) \end{vmatrix}.$$

Аналогично рассчитываются и матрицы $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$. Явный вид для них опустим в силу громоздкости аналитического выражения для матриц

$$\frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial n_i} = \left\| \begin{array}{cc} \frac{\partial}{\partial n_k} \left(\cos \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & -i \frac{\partial}{\partial n_k} \left(\frac{1}{n_k} \sin \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \\ -i \frac{\partial}{\partial n_k} \left(n_k \sin \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & \frac{\partial}{\partial n_k} \left(\cos \left(\frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \end{array} \right\|.$$

Аналитический способ позволяет вычислять точное (в пределах компьютерной арифметики) значение градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$ в точке (\vec{n}_k, \vec{d}_k) и по затратам арифметических операций он такой же, как и конечно-разностный способ. Аналитический способ целесообразней использовать, чем конечно-разностный, когда требуется высокая точность определения оптимальных параметров (\vec{n}^*, \vec{d}^*) .

О двух реализациях вычисления $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$. Основным параметром, от которого зависит скорость сходимости методов первого порядка, – это величина N (количество слоев в МОП). В зависимости от типа задач количество слоев может составлять от нескольких единиц до нескольких десятков. Так, например, в задачах, связанных с „отрезающими“ фильтрами, их количество может составлять от 20 до 50. В силу этого смысл приобретают процедуры быстрого вычисления градиента функции $F(\vec{n}, \vec{d})$.

Далее будут рассмотрены две возможных реализации вычисления $\nabla F(\vec{n}, \vec{d})$: прямолинейная и ускоренная. Обе реализации могут быть использованы как при конечно-разностном, так и при аналитическом способах вычисления градиента. При ускоренной реализации убираются (за счет использования дополнительной памяти для запоминания промежуточных результатов) повторяющиеся умножения матриц для различных $i = 1, \dots, N$, которые имеют место при прямолинейной реализации. Анализ ускорения для обоих способов показывает, что по умножению матриц ускоренная реализация выигрывает по сравнению с прямолинейной, и этот выигрыш растет с ростом N . Его целесообразно использовать при работе с количеством слоев порядка 20–40.

Содержательный смысл того ускорения, которое можно использовать при вычислении градиентов для обоих описанных способов, объясним на примере

вычисления $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ по формуле (7.39). Рассмотрим две следующих реализации вычисления матриц $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для всех $i = 1, \dots, N$:

- (i) Прямолинейная реализация, в основе которой лежит непосредственное применение формулы (7.39). Для каждого $i = 1, \dots, N$ она требует $(N - 1)$ умножений матриц размером 2×2 . Следовательно, прямолинейная реализация потребует

$$N_1^* = N(N - 1)$$

умножений матриц размером 2×2 (т.е. N раз требуется использовать $(N - 1)$ умножение матриц).

- (ii) Ускоренная реализация, при которой убираются повторяющиеся умножения матриц для различных $i = 1, \dots, N$, свойственные прямолинейной реализации. Суть ускоренной реализации состоит в следующем. Один раз вычислим такие матрицы:

$$M_i^+ = \prod_{k=1}^i M(n_k, d_k, \lambda_j), \quad i = 1, \dots, N - 1,$$

$$M_i^- = \prod_{k=i}^N M(n_k, d_k, \lambda_j), \quad i = 2, \dots, N,$$

для чего достаточно $2(N - 2)$ операций умножения матриц размером 2×2 . Затем для вычисления матриц $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для всех $i = 1, \dots, N$ взамен формулы (7.39) будем использовать формулу

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda_j)}{\partial d_1} * M_2^-, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_i} &= M_{i-1}^+ * \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda_j)}{\partial d_i} * M_{i+1}^-, \quad i = 2, \dots, N - 1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_N} &= M_{N-1}^- * \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda_j)}{\partial d_N}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

которая содержательно совпадает с (7.39), но записана в более компактном для практического применения виде. Для вычислений по формуле (7.40) требуется $2 + 2(N - 2) = 2(N - 1)$ умножений матриц размером 2×2 . Следовательно, для вычисления матриц $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для всех $i = 1, \dots, N$ ускоренная реализация потребует

$$N_2^* = 2(N - 2) + 2(N - 1) = 2(2N - 3)$$

умножений матриц размером 2×2 .

По умножению матриц ускоренная реализация выигрывает у прямолинейной реализации и этот выигрыш будет характеризовать следующая величина:

$$q(N) = \frac{N_2^*}{N_1^*} = \frac{2(2N - 3)}{N(N - 1)} = \frac{2}{N} + \frac{2(N - 2)}{N(N - 1)}.$$

При $N = 2$ и $N = 3$ имеем $q(2) = 1$ и $q(3) = 1$, что означает, что при количестве слоев, не превышающем трех, все равно какую из реализаций использовать для вычисления градиентов. Однако, уже при $N = 4$ имеется незначительный выигрыш

$$q(4) = \frac{2}{4} + \frac{2 \cdot 2}{4 \cdot 3} = \frac{1}{2} + \frac{1}{3} = \frac{5}{6},$$

который возрастает с ростом N . Так, например, при $N = 20$ имеем

$$q(20) = \frac{1}{10} + \frac{2 \cdot 18}{20 \cdot 19} \approx \frac{1}{5},$$

что означает, что при работе с 20-слойными МОП на вычислениях, связанных с умножением матриц размером 2×2 можно сэкономить в пять раз. Еще большая экономия (в 10 раз) получается при работе с 40-слойными МОП. Однако следует отметить, что при решении задач А и В с $N = 20 \div 40$ мы не получим чистого выигрыша по времени от пяти до десяти раз. Дело в том, что расчет характеристических матриц для каждого слоя требует использования трудоемких в вычислительном отношении математических функций $DSIN$ и $DCOS$, которые могут превосходить сложность операций, связанных с умножением матриц размером 2×2 .

7.3 Задачи загрузки энергосистемы с учетом экологических факторов и маневренности нагрузками энергоблоков

Рассмотрено семейство математических моделей для определения электрических нагрузок параллельно работающих энергоблоков в энергосистеме с возможностью управления загрузкой (маневренностью) отдельного семейства энергоблоков. Математические модели представлены специальными задачами нелинейного программирования с непрерывными переменными: требуется минимизи-

ровать нелинейную сепарабельную функцию при линейных и выпуклых ограничениях на переменные.

Маневренность для семейства энергоблоков моделируется неравенствами, которые для каждого энергоблока из этого семейства позволяют ограничить суммарное количество переходов по его нагрузкам для интервалов планового периода. Управление электрическими нагрузками параллельно работающих энергоблоков в энергосистеме будет включать ограничения, которые характеризуют экологические факторы при функционировании энергосистемы, и ограничения по управлению изменениями электрических нагрузок энергоблоков в соседние интервалы планового периода. Сначала будут построены математические модели линейного программирования на примере линейных функций затрат условного топлива и линейных "экологических" ограничений. Затем они будут адаптированы к нелинейным сепарабельным функциям затрат условного топлива и к нелинейным экологическим ограничениям, при этом в задачу нелинейного программирования будет добавлен ряд возможностей для управления процессом выбора нагрузок в энергосистеме.

Простейшая задача с „экологическими“ ограничениями. Пусть энергосистема состоит из N параллельно работающих энергоблоков. Для каждого энергоблока i ($i = 1, \dots, N$) заданы P_i^{low} и P_i^{up} – нижняя и верхняя границы его электрической нагрузки², c_i – затраты условного топлива на выработку единицы электрической нагрузки, a_{ik} – уровень загрязнения окружающей среды k -м фактором на выработку единицы электрической нагрузки, $k = 1, \dots, K$. Пусть T – длительность планового периода в часах. Для каждого интервала t ($t = 1, \dots, T$) задана плановая электрическая нагрузка энергосистемы E_t (в тех же единицах, что и электрические нагрузки энергоблоков). Требования на экологичность энергосистемы заданы параметрами A_k , $k = 1, \dots, K$, которые характеризует максимально допустимый уровень загрязнения окружающей среды энергосистемой за плановый период.

²Здесь под электрической нагрузкой понимается количество электрической энергии, которое энергоблок может поставлять в энергосистему. Реальная мощность энергоблока включает еще электрическую энергию, затрачиваемую на собственные нужды энергоблока, покрывающую потери в сети, и др.

Пусть $x_{i,t}$ – неизвестная электрическая нагрузка i -го энергоблока в интервале t планового периода. Тогда математическая модель задачи нахождения экологически оптимальной (по суммарным затратам условного топлива) загрузки энергоблоков на плановый период может быть сформулирована в форме следующей задачи оптимизации:

$$f^* = \min \sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T c_i x_{i,t} \quad (7.41)$$

при ограничениях

$$\sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T a_{ik} x_{i,t} \leq A_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (7.42)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{i,t} = E_t, \quad t = 1, \dots, T, \quad (7.43)$$

$$P_i^{low} \leq x_{i,t} \leq P_i^{up}, \quad i=1, \dots, N, \quad t=1, \dots, T. \quad (7.44)$$

Задача (7.41)–(7.44) имеет простой содержательный смысл. Минимизируемая функция (7.41) задает суммарные (за весь плановый период) затраты условного топлива на выработку электроэнергии, поставляемой в энергосистему всеми энергоблоками. Ограничения (7.42) означают выполнение требований на экологичность энергосистемы. Ограничения (7.43) гарантируют обязательное выполнение плана по электрической энергии в каждый из интервалов планируемого периода (запасать или складировать электрическую энергию нельзя). Ограничения (7.44) означают, что для каждого i -го энергоблока и каждого интервала t его электрическая нагрузка $x_{i,t}$ выбирается из непрерывного диапазона $[P_i^{low}, P_i^{up}]$ его электрических нагрузок (другими словами, энергоблок i выключать нельзя, он обязательно должен работать).

Задача (7.41)–(7.44) является задачей линейного программирования с блочной структурой матрицы ограничений. Здесь экологические ограничения (7.42) связывают переменные задачи по независимым блокам, каждый из которых связан со своим интервалом t из планового периода. Эта структурная особенность задачи может быть использована при разработке эффективных алгоритмов ее решения на основе декомпозиции по связывающим ограниче-

ниям и использовании методов минимизации негладких выпуклых функций [130]. Учитывая простоту решения каждой независимой подзадачи линейного программирования для отдельного интервала t , сложность такого алгоритма главным образом определяется количеством связывающих ограничений (количеством экологических факторов). Такие алгоритмы рассчитаны на эффективное решение задачи (7.41)–(7.44) при большом количестве интервалов планового периода.

Задача с учетом маневренности. Пусть неотрицательный параметр Δ_t задает максимальную величину допуска на управление такой характеристикой как суммарное изменение нагрузок всех энергоблоков при переходе из интервала t в интервал $(t + 1)$. Заметим, что минимальным значением этой характеристики является $|E_{t+1} - E_t|$, и оно будет реализовываться при $\Delta_t = 0$. Добавим к задаче (7.41)–(7.44) следующее семейство выпуклых неравенств

$$\sum_{i=1}^N |x_{i,t+1} - x_{i,t}| \leq |E_{t+1} - E_t| + \Delta_t, \quad t = 1, \dots, T - 1. \quad (7.45)$$

Рассмотрим аналогичного типа неравенства для энергоблоков. Пусть с каждым энергоблоком связан свой параметр Δ_i , который для i -го энергоблока ограничивает суммарные переходы из режима в режим за весь плановый период T . Добавим к задаче (7.41)–(7.45) следующее семейство выпуклых неравенств

$$\sum_{t=1}^T |x_{i,t+1} - x_{i,t}| \leq \Delta_i, \quad i=1, \dots, N. \quad (7.46)$$

В задаче (7.41)–(7.46) с помощью параметров $\Delta_t, t = 1, \dots, T - 1$ и $\Delta_i, i = 1, \dots, N$ можно обеспечить выбор электрических нагрузок энергоблоков, ориентированный либо на минимизацию изменений нагрузок энергоблоков между соседними интервалами, либо на минимизацию переходов по нагрузкам для отдельных энергоблоков за весь плановый период. Семейство неравенств (7.45) позволяет обеспечить небольшое количество нестандартных переходов для всех соседних интервалов планового периода. Так, например, одним из наилучших решений будет такое оптимальное решение, для которого f^* не изменяется по отношению к задаче (7.41)–(7.44), но которое достигается при

минимальной сумме всех значений параметра Δ_t . Семейство ограничений (7.46) позволяет получить сглаженные графики электрических нагрузок за плановый период для того семейства энергоблоков, в котором параметр Δ_i является сравнительно небольшим.

Задача (7.41)–(7.46) является задачей выпуклого программирования, она содержит негладкие выпуклые ограничения (7.45) и (7.46). Однако ее можно свести к задаче линейного программирования (ЛП-задаче), введя новые неотрицательные переменные $y_{i,t} = |x_{i,t} - x_{i,t-1}|$. При этом по отношению к ЛП-задаче (7.41)–(7.44) количество переменных в ЛП-задаче для маневренности увеличится почти в два раза, а количество ограничений увеличится намного больше. Каждому $y_{i,t}$ будет соответствовать два линейных неравенства: $x_{i,t} - x_{i,t-1} \leq y_{i,t}$ и $-y_{i,t} \leq x_{i,t} - x_{i,t-1}$.

Нелинейная модель с учетом маневренности. Пусть s выработкой x единиц электрической нагрузки для i -ого энергоблока связана нелинейная функция затрат условного топлива $f_i(x)$ и такие же нелинейные функции $a_{ik}(x)$ описывают влияние в энергосистеме каждого из экологических факторов $k = 1, \dots, K$.

Снабдим нелинейную модель рядом возможностей для управления режимами загрузки энергоблоков, ориентированных на активное использование ограничений (7.45) и (7.46). Для этого введем дополнительные переменные: неотрицательная переменная f_x будет характеризовать суммарные затраты условного топлива в энергосистеме; неотрицательные переменные $y_t, t = 1, \dots, T-1$ будут связаны с величиной допуска на управление суммарным изменением нагрузок всех энергоблоков при переходе из интервала t в интервал $(t + 1)$; неотрицательные переменные $z_i, i = 1, \dots, N$ будут связаны с суммарным количеством переходов по интервалам планового периода для каждого энергоблока. Управляющими параметрами для этих переменных сделаем верхние границы на их значения: f_{up} ограничивает сверху переменную f_x , Δ_t – переменную y_t , а Δ_i – переменную z_t .

Семейство ограничений (7.44) снабдим нижними ($x_{i,t}^{low}$) и верхними ($x_{i,t}^{up}$) границами на электрические нагрузки для каждого i -го энергоблока и каждого t -ого интервала планового периода. Управление ими позволит локализовать тот или иной вариант решения. С помощью этих границ можно промоделировать, как фиксированные стартовые нагрузки для первого интервала (могут определяться предисторией) $x_{i,1} = \overline{x_{i,1}}, i = \overline{1, N}$, так и выход энергосистемы на заданные нагрузки энергоблоков в конце планируемого периода – $x_{i,T} = \overline{x_{i,T}}, i = \overline{1, N}$.

Тогда, нелинейную модель с учетом маневренности можно представить в форме следующей задачи математического программирования

$$f^*(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z) = \min \lambda_x f_x + \lambda_y \sum_{t \in T_\Delta} y_t + \lambda_z \sum_{i \in I_\Delta} z_i \quad (7.47)$$

при ограничениях

$$\sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T f_i(x_{i,t}) \leq f_x, \quad 0 \leq f_x \leq f_{up}, \quad (7.48)$$

$$\sum_{i=1}^N \sum_{t=1}^T a_{ik}(x_{i,t}) \leq A_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (7.49)$$

$$\sum_{i=1}^N x_{i,t} = E_t, \quad t = 1, \dots, T, \quad (7.50)$$

$$\sum_{i=1}^N |x_{i,t+1} - x_{i,t}| \leq |E_{t+1} - E_t| + y_t, \quad t = 1, \dots, T - 1, \quad (7.51)$$

$$\sum_{t=1}^{T-1} |x_{i,t+1} - x_{i,t}| \leq z_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (7.52)$$

$$P_i^{low} \leq x_{i,t}^{low} \leq x_{i,t} \leq x_{i,t}^{up} \leq P_i^{up}, \quad i = 1, \dots, N, t = 1, \dots, T, \quad (7.53)$$

$$0 \leq y_t \leq \Delta_t, t = 1, \dots, T - 1, \quad 0 \leq z_i \leq \Delta_i, i = 1, \dots, N. \quad (7.54)$$

Здесь параметры λ_x , λ_y и λ_z дают возможность работать с целевыми функциями различного рода, которые могут быть линейными комбинациями суммарных затрат условного топлива и критериев для управления изменением электрических нагрузок по интервалам либо по энергоблокам. Так, например,

при $\lambda_x = 1$, $\lambda_y = 0$ и $\lambda_z = 0$ целевая функция соответствует суммарным затратам условного топлива; при $\lambda_x = 0$, $\lambda_y = 1$ и $\lambda_z = 0$ – суммарным изменениям электрических нагрузок по всем соседним интервалам для интервалов из множества T_Δ ; при $\lambda_x = 0$, $\lambda_y = 0$ и $\lambda_z = 1$ – суммарным изменениям электрических нагрузок за весь плановый период для энергоблоков из множества I_Δ . При $\lambda_x = 0$, $\lambda_y = 0$ и $\lambda_z = 0$ решение задачи (7.48)–(7.54) равносильно проверке совместности системы ограничений (7.49)–(7.54).

Задача (7.48)–(7.54) является задачей нелинейного программирования с непрерывными переменными и той особенностью, что все нелинейные функции $f_i(\cdot)$ и $a_{ik}(\cdot)$ являются сепарабельными (зависят только от неизвестной электрической нагрузки энергоблока). Самым важным есть случай, когда какие-либо из нелинейных функций оказываются невыпуклыми. Тогда задача может быть многоэкстремальной, анализ ее решений не так прост. Более простым есть случай, когда все нелинейные функции являются выпуклыми. Тогда задача (7.48)–(7.54) является задачей выпуклого программирования, для ее решения существует много оптимизационных программ. Проблемы здесь связаны главным образом с размерностью задач. Самым простым есть случай, когда функции $f_i(\cdot)$ и $a_{ik}(\cdot)$ являются линейными. Тогда задачу (7.48)–(7.54) можно свести к задаче линейного программирования, точно так же, как и задачу (7.41)–(7.46).

О методах решения. Задачу (7.48)–(7.54) и оптимизационные алгоритмы ее решения целесообразно использовать для анализа задач суточной почасовой загрузки энергосистемы с параллельно работающими энергоблоками, количество которых не превосходит 25. Такое количество энергоблоков является максимальным, если в качестве энергосистемы рассматривать отдельные энергокомпании Украины. Этого вполне достаточно, если в качестве энергосистемы рассматривать только отдельные тепловые электростанции Украины (для них количество энергоблоков не превосходит 12). В этом случае задача (7.48)–(7.54) содержит до 649 переменных, и ее решение можно обеспечить с помощью r -алгоритма (одного из эффективных методов минимизации).

ции негладких выпуклых функций с овражными особенностями) [130, 198]. В качестве альтернативного варианта решения этих задач можно использовать известные программы KNITRO, LOQO, MINOS, SNOPT. Они входят в набор программ, для которых известный оптимизационный сервер NEOS (см. <http://www.neos-server.org/neos/>) предоставляет услуги по решению задач нелинейного программирования, описанных на языке моделирования AMPL [170]. Численные эксперименты по решению на NEOS-сервере задач вида (7.48)–(7.54) как с линейными, так и выпуклыми кусочно-линейными функциями $f_i(\cdot)$ и $a_{ik}(\cdot)$ подробно описаны на стр. 10–12 монографии [118].

7.4 Негладкий штраф и субградиентные методы для решения задачи проекции на политоп

Рассмотрена проблема поиска вектора минимальной длины в выпуклой оболочке конечного набора векторов конечномерного евклидова пространства. Она сводится к эквивалентной негладкой экстремальной задаче, для которой устанавливается величина штрафного параметра. Для решения последней предлагается использовать алгоритмы субградиентного спуска с преобразованием пространства.

Постановка задачи. В подразделе рассматривается задача проекции начала координат на выпуклый многогранник. Задано множество n -мерных векторов $\mathcal{X} = \{\hat{x}^1, \hat{x}^2, \dots, \hat{x}^m\}$, требуется найти вектор с минимальной нормой в их выпуклой оболочке (политопе):

$$\begin{aligned} \min_{x \in \text{co}(\mathcal{X})} \|x\|^2 &= \min_{\substack{x = \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{x}^i \\ \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1, \lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m.}} \|x\|^2 \end{aligned} \quad (7.55)$$

Данная задача представляет интерес для многих приложений, а также может служить основой для решения аналогичной проблемы для многогранников, заданных иным способом [40].

Для задачи проекции (в постановке (7.55) и других) создано значительное количество различных алгоритмов [158], однако в связи с многими спе-

цифическими приложениями продолжается разработка новых методов. Потребность в них мотивируется чрезвычайно высокой размерностью (7.55) в практических задачах обработки изображений, планировании радиационной терапии в медицинской информатике [164], аппроксимации геофизических полей [7] и др.

Ниже построено семейство алгоритмов для решения задачи (7.55) методами минимизации негладких выпуклых функций с проектированием на неотрицательный ортант. С помощью метода негладких штрафных функций задача (7.55) сведена к негладкой экстремальной задаче (минимизации негладкой выпуклой функции при ограничениях на неотрицательность переменных) и исследован вопрос выбора конечной штрафной константы, обеспечивающей такую эквивалентность. Обсуждается применение r -алгоритмов [130] для решения негладкой экстремальной задачи.

Проекция как задача квадратичного программирования. Пусть матрица X размера $m \times n$ составлена из вектор-столбцов $\hat{x}^1, \hat{x}^2, \dots, \hat{x}^m$, а вектор λ размера m состоит из компонент $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$. Тогда задаче (7.55) соответствует задача квадратичного программирования

$$\min_{\lambda} \left\| \sum_{i=1}^m \lambda_i \hat{x}^i \right\|^2 = \min_{\lambda} \|X\lambda\|^2 = \|X\lambda^*\|^2 = \|x^*\|^2 = d_* \quad (7.56)$$

при ограничениях

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1, \quad (7.57)$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (7.58)$$

Здесь λ^* – необязательно единственное оптимальное решение (барицентрические координаты) задачи (7.56)–(7.58), а x^* – вектор минимальной нормы, который является выпуклой комбинацией векторов $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_m$, т.е. $x^* = X\lambda^* = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \hat{x}^i$, где $\sum_{i=1}^m \lambda_i^* = 1$, $\lambda_i^* \geq 0, i = 1, \dots, m$. Вектор x^* является единственным в силу строгой выпуклости целевой функции (7.55) по переменным x .

Непосредственному решению задачи (7.56)–(7.58) как задачи квадратичного программирования с использованием стандартных средств [10] препят-

ствуется ее вырожденность как в формулировке (7.55), так и в формулировке (7.56)–(7.58), где она неизбежно возникает в наиболее интересном с точки зрения приложений случае $m > n$. Поэтому далее модифицируем (7.56)–(7.58) с целью построения в конечном итоге эквивалентной негладкой задачи.

Рассмотрим задачу квадратичного программирования

$$d_* = \min \|X\lambda\|^2 \quad (7.59)$$

при ограничениях

$$-\sum_{i=1}^m \lambda_i + 1 \leq 0, \quad (7.60)$$

$$\lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (7.61)$$

Она получена из задачи (7.56)–(7.58) заменой ограничения-равенства (7.57) ограничением-неравенством $\sum_{i=1}^m \lambda_i \geq 1$, которое записано в форме (7.60) для удобства дальнейшего изложения.

Лемма 7.1 Пусть $d_* > 0$. Тогда задача (7.59)–(7.61) полностью эквивалентна задаче (7.56)–(7.58) в том смысле, что множества оптимальных решений обеих задач совпадают.

Доказательство. Пусть у задачи (7.59)–(7.61) существует оптимальное решение $\tilde{\lambda}^* = (\tilde{\lambda}_1^*, \tilde{\lambda}_2^*, \dots, \tilde{\lambda}_m^*)^T$ такое, что $\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i^* > 1$. Пусть также ему соответствует оптимальное значение целевой функции $\tilde{d}_* = \|\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i^* \hat{x}^i\|^2$. Тогда вектор $\bar{\lambda}^*$ с компонентами

$$\bar{\lambda}_i^* = \frac{\tilde{\lambda}_i^*}{\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i^*}, \quad i = 1, \dots, m,$$

для которых $\sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i^* = 1$, удовлетворяет ограничениям (7.60) и (7.61) и для целевой функции (7.59) обеспечивает значение

$$\bar{d}_* = \|X\bar{\lambda}^*\|^2 = \frac{\tilde{d}_*}{\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i^*} < \tilde{d}_*,$$

что противоречит оптимальности точки $\tilde{\lambda}^*$ в задаче (7.59)–(7.61). \square

Если $d_* = 0$, то задача (7.59)–(7.61) не эквивалентна задаче (7.56)–(7.58), так как множество ее решений расширяется за счет того, что любому оптимальному решению λ^* задачи (7.56)–(7.58) в задаче (7.59)–(7.61) соответствует множество оптимальных решений $\tilde{\lambda}^* = \mu\lambda^*$, где $\mu \geq 1$. Обе задачи эквивалентны только в том смысле, что им соответствует одно и то же значение целевой функции $d_* = 0$.

Негладкий штраф в задаче (7.59)–(7.61) и его свойства. Пусть для учета ограничения (7.60) используется негладкая штрафная функция в форме функции максимума

$$\Phi_P(\lambda) = \|X\lambda\|^2 + P \cdot \max\{0, -\sum_{i=1}^m \lambda_i + 1\}, \quad (7.62)$$

где $P > 0$ – штрафной параметр.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 7.1 При $P > 2d_*$ задача (7.59)–(7.61) эквивалентна задаче

$$d_* = \min_{\lambda \geq 0} \Phi_P(\lambda). \quad (7.63)$$

Доказательство. С помощью теоремы Б.Н.Пшеничного [51] (теорема 2.14, с. 25) установим конечное значение штрафного параметра P , при котором задача (7.63) эквивалентна задаче (7.59)–(7.61). Рассмотрим семейство параметрических задач

$$V(t) = \inf_{\lambda} \left\{ \|X\lambda\|^2 : -\sum_{i=1}^m \lambda_i + 1 \leq t; \lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, m \right\},$$

зависящее от параметра $t \in R$. Очевидно, что

$$V(0) = \inf_{\lambda} \left\{ \|X\lambda\|^2 : -\sum_{i=1}^m \lambda_i + 1 \leq 0; \lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, m \right\}$$

совпадает с решением задачи (7.59)–(7.61), откуда имеем $V(0) = d_*$.

Теорема Пшеничного утверждает следующее. Пусть $\inf_{t>0} \frac{V(t)-V(0)}{t} = -L > -\infty$. Если $P > L$, то точки минимума задач $V(0)$ и $\min_{\lambda \geq 0} \Phi_P(\lambda)$, где $\Phi_P(\lambda)$ определяется по формуле (7.62), совпадают.

Для установки штрафного параметра достаточно посчитать "нужный" инфинум, т.е. $-L$. Представим его в следующей форме:

$$-L = \inf_{t>0} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \min \left\{ \inf_{0<t<1} \frac{V(t) - V(0)}{t}, \inf_{t \geq 1} \frac{V(t) - V(0)}{t} \right\}. \quad (7.64)$$

Вторую часть под минимумом в (7.64) легко посчитать с учетом того, что при $t \geq 1$ имеем $V(t) = 0$, а $V(0) = d_* > 0$, откуда следует

$$\inf_{t \geq 1} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \inf_{t \geq 1} \frac{-V(0)}{t} = -V(0).$$

С учетом последнего равенства из (7.64) получаем

$$-L = \inf_{t>0} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \min \left\{ \inf_{0<t<1} \frac{V(t) - V(0)}{t}, -V(0) \right\}. \quad (7.65)$$

Семейство параметрических задач $V(t)$ при $0 < t < 1$ запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} V(t) &= \inf_{\lambda} \left\{ \|X\lambda\|^2 : -\sum_{i=1}^m \lambda_i + 1 \leq t; \lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, m \right\} = \\ &= \inf_{\lambda} \left\{ \|X\lambda\|^2 : -\sum_{i=1}^m \lambda_i + (1-t) \leq 0; \lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, m \right\} = \\ &= \inf_{\lambda} \left\{ \|X\lambda\|^2 : -\sum_{i=1}^m \frac{\lambda_i}{1-t} + 1 \leq 0; \frac{\lambda_i}{1-t} \geq 0, i = 1, \dots, m \right\}. \end{aligned}$$

Отсюда, сделав замену переменных $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{1-t}$, получим

$$V(t) = (1-t)^2 \inf_{\tilde{\lambda}} \left\{ \|X\tilde{\lambda}\|^2 : -\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i + 1 \leq 0; \tilde{\lambda}_i \geq 0 \right\} = (1-t)^2 V(0).$$

В результате имеем

$$\inf_{0<t<1} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \inf_{0<t<1} \frac{(1-t)^2 - 1}{t} V(0) = \inf_{0<t<1} (-2+t)V(0) = -2V(0).$$

Подставив его в (7.65), получим

$$-L = \min\{-2V(0), -V(0)\} = -2V(0),$$

откуда с учетом того, что $V(0) = d_*$, имеем $L = 2V(0) = 2d_*$. \square

Связь негладкой задачи с задачей (7.56)–(7.58). В случае когда $d_* > 0$, задача (7.56)–(7.58) и задача (7.59)–(7.61) полностью эквивалентны. Поэтому оптимальное решение задачи (7.63) при выборе значения P согласно теореме 1 дает оптимальное решение задачи (7.56)–(7.58). Субградиент выпуклой негладкой функции $\Phi_P(\lambda)$ в точке $\bar{\lambda} = (\bar{\lambda}_1, \dots, \bar{\lambda}_n)$, где $\bar{\lambda}_i \geq 0, i = 1, m$, определяется по правилу

$$g_{\Phi}(\bar{\lambda}) = \begin{cases} 2X^T X\bar{\lambda}, & \text{если } \sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i > 1, \\ 2X^T X\bar{\lambda} - Pe, & \text{если } \sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i \leq 1, \end{cases}$$

где m -мерный вектор e состоит из всех единиц. Свойства субградиента в точке минимума функции $\Phi_P(\lambda)$ позволяют усилить результат теоремы 7.1, перенеся его на случай задачи (7.56)–(7.58) и когда $d_* = 0$.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 7.2 Пусть $\tilde{\lambda}^* = (\tilde{\lambda}_1^*, \dots, \tilde{\lambda}_n^*)$ – оптимальное решение задачи (9) при $P > 2d_*$. Тогда вектор λ^* и вектор x^* , которые определяются по правилу

$$\lambda_i^* = \frac{\tilde{\lambda}_i^*}{\sum_{i=1}^m \tilde{\lambda}_i^*}, i = 1, \dots, m, \quad x^* = X\lambda^*,$$

являются оптимальным решением задачи (7.56)–(7.58).

Теорема 7.2 дает достаточные условия для нахождения проекции с помощью методов минимизации негладких функций. Она включает как случай $d_* > 0$, так и случай $d_* = 0$. Последний в теореме использует критерий останова для методов негладкой оптимизации, который определяется равенством нулю субградиента минимизируемой функции, т.е. $g_{\Phi}(\tilde{\lambda}^*) \equiv 0$. В этом случае, чтобы получить оптимальное решение для задачи (7.56)–(7.58), достаточно оптимальную для задачи (7.63) точку $\tilde{\lambda}^*$ отмасштабировать так, чтобы она удовлетворяла требованию выпуклой комбинации. В случае, когда $d_* > 0$, такое масштабирование излишне, так как за него отвечает выбор величины штрафа P согласно теореме 7.1.

О применении субградиентных алгоритмов в задаче проекции. Для нахождения проекции начала координат на выпуклый многогранник

вместо задачи (7.56)–(7.58) можем решать негладкую выпуклую задачу (7.63). Для этого подойдет любой из субградиентных методов минимизации негладких выпуклых функций, позволяющий учитывать неотрицательность переменных. Например, для решения задачи (7.63) можно использовать r -алгоритмы [130], эффективные при решении задач негладкой оптимизации большой размерности. Эти методы нечувствительны к вырожденности матрицы $X^T X$, обладают устойчивостью по отношению к выбору начального приближения и достаточно быстрой сходимостью.

При использовании r -алгоритмов возможны следующие варианты. Вариант первый определяется стандартным приемом решения таких задач и связан с четным продолжением выпуклой функции на все пространство путем замены переменных $\lambda_i = |x_i|$, $i = 1, \dots, m$. В результате получаем многоэкстремальную функцию $F(x) = \Phi_P(|x_1|, \dots, |x_m|) = \Phi_P(\lambda)$, в которой все локальные минимумы глобальны. Для нахождения локальных минимумов функции $F(x)$ можно применять любой из методов минимизации негладких функций. Практика использования r -алгоритмов показала, что такой подход дает надежные результаты и в определенном смысле лучше метода негладких штрафных функций, так как не требует подбора штрафных параметров. Эта схема достаточно просто реализуется и будет эффективной при решении задач (7.63), когда количество нулевых компонент в оптимальном решении λ^* сравнительно небольшое по отношению к количеству векторов m .

Вариант второй связан со случаем $m \gg n$, который характеризуется большим количеством нулевых компонент в оптимальном векторе λ^* . Здесь целесообразнее использовать модификации r -алгоритмов, разработанные специально для учета простейших границ на переменные. В работе [48] предложена модификация r -алгоритма, в которой по определенным правилам происходит временная фиксация нулевых значений ряда переменных либо их освобождение. Более алгоритмически обоснованные правила для фиксации и освобождения переменных предложены в [31]. Модификации r -алгоритмов, базирующиеся на этих правилах, связаны с процессом минимизации по неко-

тому подмножеству переменных, и естественно, что на ряде практических задач они показали значительное уменьшение числа итераций в сравнении со схемой четного продолжения. Их реализация для задачи проекции позволяет также ускорить вычисление субградиента.

Следует отметить, что ускоренная сходимость r -алгоритмов, устойчивость по отношению к выбору начального приближения и нечувствительность к вырожденности задачи квадратичного программирования позволяют обеспечить реализацию на их основе эффективных алгоритмов для задачи проекции. Эти особенности алгоритма делают его перспективным для реализации проективных задач большой размерности в системах параллельных или распределенных вычислений.

7.5 Основные результаты раздела 7

В разделе описаны математические модели для ряда прикладных экстремальных задач и методы их решения на основе субградиентных методов с растяжением пространства. Кратко основные научные результаты раздела можно сформулировать следующим образом.

1. Разработаны математические модели, методы и программное обеспечение для двух семейств задач нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети. Математические модели представлены задачами линейного программирования большой размерности с блочной структурой матрицы ограничений.
2. Исследованы две задачи для нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий, которые сформулированы как многоэкстремальные задачи нелинейного программирования со сложным видом целевой функции. Обсуждаются вопросы нахождения локальных экстремумов этих задач с помощью методов первого порядка и анализируются способы вычисления градиента целевой функции в зависимости от количества слоев в оптическом покрытии.

3. Разработано семейство математических моделей для определения электрических нагрузок параллельно работающих энергоблоков в энергосистеме с возможностью управления загрузкой (маневренностью) отдельного семейства энергоблоков. Математические модели представлены специальными задачами нелинейного программирования с непрерывными переменными: требуется минимизировать нелинейную сепарабельную функцию при линейных и выпуклых ограничениях на переменные.
4. Проблема поиска вектора минимальной длины в выпуклой оболочке конечного набора векторов конечномерного евклидова пространства сведена к эквивалентной негладкой экстремальной задаче. Для последней устанавливается величина штрафного параметра и предлагается использовать алгоритмы субградиентного спуска с преобразованием пространства.

Результаты опубликованы в двух³ монографиях, четырех⁴ статьях (все в фаховых изданиях) и докладывались на шести⁵ конференциях различного уровня.

³[26] Задачі оптимального проектування надійних мереж / Н.З. Шор, І.В. Сергієнко, П.І. Стецюк та ін. – Київ, Наукова думка, 2005. – 230 с. [118] Стецюк П.І., Журбенко М.Г., Лиховид О.П. Математичні моделі та програмне забезпечення в задачах енергетики. – Київ: ПП "Ательє "Поліграфічний комплекс", 2012. – 64 с.

⁴[79] Стецюк П.І., Мица А.В. О вычислении градиента в задаче синтеза оптических покрытий // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2004. – С.127–133. [81] Стецюк П.І., Мица А.В. О задачах оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – № 4. – С.107–115. [96] Стецюк П.І., Лиховид А.П., Пилиповский А.В. Задачи оптимизации для выбора электрических нагрузок в энергосистеме // Теорія оптимальних рішень. – Київ, №8, 2009. – С.136–141. [99] Стецюк П.І., Нурминский Е.А. Негладкий штраф и субградиентные алгоритмы для решения задачи проекции на политоп // Кибернетика и системный анализ. – 2010. – №1. – С.59–63.

⁵[70] Стецюк П.І. Линейная модель для нахождения пропускных способностей компонент надежной сети // Збірник наукових праць „Комп'ютерна математика. Оптимізація обчислень.“ – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2001, Т.1. – С.376–384. (доповідь на конференції „Оптимізація обчислень“, 21–27 вересня 2001 р., с. Кацивелі, Крим). [80] Стецюк П.І., Мица О.В. До використання методів першого порядку в задачах оптимізації багатопарових оптичних плівок // II-а Міжнародна школа-семинар "Теорія прийняття рішень", Ужгород, 27 вересня – 2 жовтня 2004. Праці школи-семинару. – С. 88. [37] Мица О.В., Стецюк П.І. Дослідження оптимізації спектральних характеристик семишарового оптичного покриття з чергуючимися шарами // III-а Міжнародна школа-семинар "Теорія прийняття рішень", Ужгород, 2 – 7 жовтня 2006. Праці школи-семинару. – С. 73–74. [93] Стецюк П.І., Пилиповский А.В. Математическая модель оптимальной загрузки мощностей энергосистемы с учетом их маневренности // Праці IV міжнародної школи-семинару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2008. – С.159. [97] Стецюк П.І., Лиховид А.П., Пилиповский А.В. О решении одного класса оптимизационных задач нахождения нагрузок энергетических объектов с помощью NEOS-программ // Праці міжнародного симпозиуму "Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXV)". – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2009. – Т.2. – С.350–354. [191] Nurminski E. A., Stetsyuk P. I. Nonsmooth optimization and projection problem // II International Conference "Optimization and Applications (OPTIMA-2011), Abstracts. – Petrovac, Montenegro, September 25 - October 2, 2011, М.: Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, 2011, стр. 167–168.

Выводы

Диссертационная работа посвящена развитию методов негладкой оптимизации на основе двух центральных идей Наума Зуселевича Шора: использование линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций и двойственный подход к получению и уточнению оценок целевой функции в невыпуклых квадратичных моделях.

В диссертации предложены и исследованы новые методы минимизации негладких выпуклых функций и новые способы усовершенствования лагранжевых двойственных оценок в квадратичных экстремальных задачах с булевыми и бинарными переменными. На их основе разработаны новые эффективные алгоритмы для ряда задач оптимизации и построены уточненные оценки для NP-сложных экстремальных задач на графах.

Получены следующие основные результаты.

1. Разработан приближенный и ускоренный методы эллипсоидов – новые модификации метода эллипсоидов. Обоснована их сходимость со скоростью геометрической прогрессии, в которой знаменатель зависит только от размерности пространства. Исследована связь построенных методов с методом эллипсоидов Юдина – Немировского – Шора.
2. Разработаны и обоснованы два новых субградиентных метода с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. Эффективность методов для овражных функций подтверждена результатами вычислительных экспериментов.
3. На основе разработанных методов построены: алгоритм нахождения L_p -решения переопределенной системы линейных уравнений при двусторонних ограничениях на компоненты решения; алгоритм нахождения допустимой точки выпуклого неравенства; три итерационных метода нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений.

4. Предложены три способа построения функционально избыточных ограничений в квадратичных экстремальных задачах с булевыми и бинарными переменными. Первые два способа генерируют квадратичные равенства, соответствующие введению новых переменных в форме произведения уже существующих переменных. Третий способ для бинарных переменных генерирует квадратичные неравенства, которые являются следствием того, что квадрат суммы нечетного количества ± 1 не меньше единицы. На их основе уточнены лагранжевые двойственные оценки для ряда задач (см. пункты 5, 6 и 7).
5. Для задач максимизации квадратичной функции с бинарными или булевыми переменными построены квадратичные экстремальные задачи, которым соответствуют более точные верхние оценки. Построена полиэдральная аппроксимация сверху для бинарного квадратичного многогранника, которая для двух, трех и четырех переменных является точной.
6. Построены новые верхние оценки для числа устойчивости (независимости) графа, которые уточняют самую точную из предложенных Н.З. Шором верхних оценок. Построены новые квадратичные модели для взвешенного максимального разреза графа, для которых соответствующие верхние оценки являются не хуже, чем лучшая из двух оценок – Барахонны – Маджуба (1986 г.) и Шора – Березовского (1995 г.).
7. Построены две новые верхние оценки для взвешенного числа устойчивости графа, они определяются оптимальными значениями целевой функции в задачах линейного программирования с количеством ограничений, которое кубически зависит от числа вершин в графе. Показано, что обе оценки являются точными для t -перфектного графа.
8. Найдены новые свойства наилучшей из оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа. Они связаны с подграфом, который известен как p -колесо, и позволили построить новое семейство графов – W_p -совершенные графы. Для них наилучшая оценка Шора является точной

и взвешенное число устойчивости графа может быть найдено за полиномиальное время.

9. Разработан итерационный алгоритм нахождения верхней оценки для взвешенного числа устойчивости графа, в котором многогранник устойчивых множеств аппроксимируется задачей линейного программирования с поэтапным дополнением ее конечным числом ограничений, соответствующих нарушенным линейным неравенствам для нечетных циклов и p -колес. Алгоритм программно реализован и проверен для графов, содержащих несколько тысяч вершин.
10. Разработаны квадратичные экстремальные модели и методы получения оценок для задачи о максимальном разрезе взвешенного графа с заданными количествами вершин в подмножествах разбиения вершин графа и задачи нахождения глобального минимума квадратичной функции на многообразия Штифеля.
11. Разработаны математические модели, методы и программное обеспечение для задачи нахождения оптимальных нормированных структур конечного выпуска и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева; задач нахождения пропускных способностей дуг надежной ориентированной сети с передачей потоков произвольными путями и с передачей потоков по заданном множестве допустимых путей; задач нахождения оптимальных параметров плоских многослойных оптических покрытий; задачи нахождения нагрузок энергосистемы с учетом маневренности отдельного семейства энергоблоков.

Литература

- [1] Ашманов С.А. Введение в математическую экономику. – М.: Наука, 1984. – 296 с.
- [2] Березовский О.А., Стецюк П.И. Об одном способе нахождения двойственных квадратичных оценок Шора // Кибернетика и системный анализ. – 2008. – № 2. – С. 89–99.
- [3] Березовский О.А. О нижней оценке для одной квадратичной задачи на многообразии Штифеля // Кибернетика и системный анализ. – 2008. – №5. – С. 95–103.
- [4] Берж К. Теория графов и ее применение. – М.: Издательство иностранной литературы, 1962. – 320 с.
- [5] Бондаренко А.В., Кошлай Л.Б., Стецюк П.И. Об одной задаче нахождения оптимальной структуры спроса и добавленной стоимости // Матер. II Міжнар. наук.-методичної конф. „Математичні методи, моделі та інформаційні технології в економіці.“ – Чернівці: ДрукАрт, 2011 – С. 26–27.
- [6] Бортис Г. Институты, поведение и экономическая теория. Вклад в классико-кейнсианскую политическую экономию. – Киев: Изд. дом “Киево-Могилянська академія“, 2009. – 598 с.
- [7] Васин В.В. Итерационные процессы фейеровского типа в некорректных задачах с априорной информацией // Изв. вузов. Математика. – 2009. – Вып. 2. – С. 3–24.
- [8] Васин В.В., Еремин И.И. Операторы и итерационные процессы фейеровского типа (теория и приложения). – Москва, Ижевск: Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 200 с.
- [9] Гершович В.И., Шор Н.З. Метод эллипсоидов, его обобщения и приложения // Кибернетика. – 1982. – №5. – С. 61–69.
- [10] Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. – М.: Мир, 1974. – 376 с.
- [11] Гэри М., Джонсон Д. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. – М.: Мир, 1982. – 416 с.

- [12] Дикин И.И. Итеративное решение задач линейного и квадратичного программирования // Докл. АН СССР. – 1967. – 174. – С. 747–748.
- [13] Дикин И.И., Зоркальцев В.И. Итеративное решение задач математического программирования. – Новосибирск: Наука, 1980. – 128 с.
- [14] Еремин И.И. Релаксационный метод решения систем неравенств с выпуклыми функциями // Докл. АН СССР. – 1965. – **160**. – № 5. – С. 994–996.
- [15] Еремин И.И. Обобщение релаксационного метода Агмона-Моцкина // Успехи мат. наук. – 1965. – Т. XX. – Вып. 2(122). – С. 183–187.
- [16] Ермольев Ю. М. Методы решения нелинейных экстремальных задач // Кибернетика. – 1966. – № 4.
- [17] Журбенко Н.Г. Об одном классе методов минимизации с преобразованием пространства // Методы решения экстремальных задач. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1996. – С. 68–80.
- [18] Журбенко Н.Г. Оценка эффективности одного класса субградиентных методов минимизации с преобразованием пространства // Оптимизация и ее приложения. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1997. – С. 49–54.
- [19] Журбенко Н.Г. Построение семейства методов сопряженных направлений на основе использования оператора растяжения пространства // Теория и приложения методов оптимизации. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1998. – С. 12–18.
- [20] Журбенко Н.Г. Квазиньтоновские алгоритмы минимизации на основе использования оператора растяжения пространства // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1999. – С. 45–50.
- [21] Журбенко Н.Г. Алгоритм проектирования на политоп // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2008. – №7. – С. 125–132.
- [22] Журбенко Н.Г. Субградиентный алгоритм минимизации с преобразованием пространства $\alpha(\varepsilon)$ -алгоритм // Стохастическое программирование

- и его приложения / Под ред. П.С. Кнопова, В.И. Зоркальцева, Я.М. Иваньо. – Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. – С. 36–51.
- [23] Журбенко Н.Г. Операторы преобразования пространства в квазиньютоновских методах и методах сопряженных градиентов // Стохастическое программирование и его приложения / Под ред. П.С. Кнопова, В.И. Зоркальцева, Я.М. Иваньо. – Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. – С. 52–58.
- [24] Журбенко Н.Г., Марчук Т.В. Алгоритм минимизации негладких функционалов / $r(\alpha)$ -алгоритм/ – Киев: АН УССР, РФАП, 1976. – №22.
- [25] Журбенко М.Г., Стецюк П.І. Субградієнтні методи змінної метрики для розв'язування яружних задач оптимізації. – Київ, 2009. – 27 с. – (Препр. / НАН України. Ін-т кібернетики імені В.М.Глушкова; 2009-3).
- [26] Задачі оптимального проектування надійних мереж / Н.З. Шор, І.В. Сергієнко, П.І. Стецюк та ін. – Київ: Наукова думка, 2005. – 230 с.
- [27] Золотых Н.Ю. Новая модификация метода двойного описания для построения остова многогранного конуса // Матер. III Всероссийской конф. „Проблемы оптимизации и экономические приложения“. – Омск: ОмГТУ, 2006. – С. 140.
- [28] Золотых Н.Ю., Стецюк П.І. О внешней аппроксимации бинарного и булевого квадратичных многогранников // Пр. V-ої міжнар. школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2010. – С. 103–104.
- [29] Зоркальцев В.И., Пержабинский С.М. Обоснование алгоритмов внутренних точек для задач нелинейного программирования // Стохастическое программирование и его приложения / Под ред. П.С. Кнопова, В.И. Зоркальцева, Я.М. Иваньо. – Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. – С. 59–75.
- [30] Киселева Е.М., Шор Н.З. Непрерывные задачи оптимального разбиения множеств: теория, алгоритмы, приложения. – К.: Наук. думка, 2005. – 564 с.

- [31] Кунцевич А.В. К вопросу об эффективности применения алгоритмов оптимизации с растяжением пространства // Кибернетика. – 1989. – №2. – С. 116–117.
- [32] Леонтьев В.В. Избранные произведения. Т. 1–3. – М.: Экономика, 2006 – 2008.
- [33] Математичні методи оптимізації та інтелектуальні комп'ютерні технології моделювання складних процесів і систем з урахуванням просторових форм об'єктів / Грицик В.В., Шевченко А.І., Стецюк П.І. та ін. – Донецьк: ІПІ "Наука і освіта", 2011. – 480 с.
- [34] Михалевич В.С., Трубин В.А., Шор Н.З. Оптимизационные задачи производственно-транспортного планирования. – М.: Наука, 1986. – 264 с.
- [35] Михалевич М.В., Сергиенко И.В. Моделирование переходной экономики. Модели, методы, информационные технологии. – Киев: Наук. думка, 2005. – 670 с.
- [36] Міца О.В., Стецюк П.І. Задача знаходження оптимальних параметрів однорідного оптичного покриття // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. – С. 127–134.
- [37] Міца О.В., Стецюк П.І. Дослідження оптимізації спектральних характеристик семишарового оптичного покриття з чергуючимися шарами // Пр. ІІІ-ої міжнар. школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2006. – С. 73–74.
- [38] Немировский А.С., Юдин Д.Б. Сложность задач и эффективность методов оптимизации. – М.: Наука, 1979. – 383 с.
- [39] Нестеров Ю.Е. Эффективные методы в нелинейном программировании. – М.: Радио и связь, 1989. – 304 с.
- [40] Нурминский Е.А. Проекция на внешне заданные полиэдры // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 2008. – 48. – Вып. 3. – С. 387–396.

- [41] Нурминский Е.А. Фейеровские алгоритмы с адаптивным шагом // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 2011. – **51**. – Вып. 5. – С. 791–801.
- [42] Octave [Электронный ресурс]: <http://www.octave.org/> – Режим доступа: свободный.
- [43] Пападимитриу Х., Стайглиц К. Комбинаторная оптимизация: Алгоритмы и сложность. – М.: Мир, 1985. – 510 с.
- [44] Полак Э. Численные методы оптимизации. Единый подход. – М.: Мир, 1974. – 376 с.
- [45] Поляк Б.Т. Один общий метод решения экстремальных задач // Докл. АН СССР, 1967. – **174**. – № 1. – С. 33–36.
- [46] Поляк Б.Т. Минимизация негладких функционалов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1969. – **9**. – № 3. – С. 507–521.
- [47] Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384 с.
- [48] Приятель А.М. Решение задачи выпуклого программирования при помощи r -алгоритма с проектированием // Исследования методов решения экстремальных задач. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова АН УССР, 1986. – С. 24–30.
- [49] Проблемы Гильберта / Под. ред. П.С.Александрова. – М.: Наука, 1969. – 238 с.
- [50] Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. – М.: Наука, 1975. – 319 с.
- [51] Пшеничный Б.Н. Метод линеаризации. – М.: Наука, 1983. – 136 с.
- [52] Ржевский С.В. Монотонные методы выпуклого программирования. – Киев: Наукова думка, 1993. – 324 с.
- [53] Сборник научных программ на ФОРТРАНе: Руководство программиста. Вып. 2. Матричная алгебра и линейная алгебра. – М.: Статистика, 1974. – 224 с.
- [54] Сергієнко І.В. Методи оптимізації та системного аналізу для задач трансчислювальної складності. – Київ: Академперіодика, 2010. – 296 с.

- [55] Сергиенко И.В., Михалевич М.В., Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Модели и информационные технологии для поддержки принятия решений при проведении структурно-технологических преобразований // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – № 2. – С. 26–49.
- [56] Сергиенко И.В., Стецюк П.И. О трех научных идеях Н.З.Шора // Кибернетика и системный анализ. – 2012. – №1. – С. 4–22.
- [57] Сергиенко И.В., Стецюк П.И. Три центральные идеи Н. З. Шора // Мат. 3-й Междунар. науч. конф. „Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии“ (Кишинэу, 19–23 марта 2012 г.). – Кишинэу: Эврика, 2012. – С. 468–475.
- [58] Скоков В.А. Замечания к методам минимизации, использующим операцию растяжения пространства // Кибернетика. – 1974. – №4. – С. 115–117.
- [59] Статистическая информация [Электронный ресурс]: Таблица "Затраты-выпуск"(в ценах потребителей) / Госкомстат Украины. – <http://www.ukrstat.gov.ua>. – Режим доступа: свободный.
- [60] Стецюк П.И. r -алгоритмы и эллипсоиды // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №1. – С. 113–134.
- [61] Стецюк П.И. Метод центров тяжести простых тел // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №5. – С. 117–138.
- [62] Стецюк П.И. Классические фейеровские методы с преобразованием пространства // Методы решения экстремальных задач. – Киев: Ин-т кибернетики им В.М.Глушкова НАН Украины, 1996. – С. 3–9.
- [63] Стецюк П.И. Квазиньютоновские методы и r -алгоритмы – Киев, 1996. – 21 с. – (Препр. / НАН Украины. Ин-т кибернетики им В.М.Глушкова: 96-10)
- [64] Стецюк П.И. Ортогонализирующие линейные операторы в выпуклом программировании // Кибернетика и системный анализ. – 1997. – № 3. – С. 97–119.

- [65] Стецюк П.И. Линейные операторы в квазиньютоновских методах // Теория и приложения методов оптимизации. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1998. – С. 3–8.
- [66] Стецюк П.И. К методам эллипсоидов // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 1999. – С. 27–33.
- [67] Стецюк П.И. Об одном методе для нахождения допустимой точки выпуклого неравенства // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2000. – С. 3–10.
- [68] Стецюк П.И., Колесник Ю.Г. К вопросу выбора метода аппроксимации результатов измерений // Интеллектуальные информационно-аналитические системы и комплексы. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2000. – С. 62–67.
- [69] Стецюк П.И. К методам решения плохообусловленных систем линейных уравнений // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2001. – С. 9–15.
- [70] Стецюк П.И. Линейная модель для нахождения пропускных способностей компонент надежной сети // Компьютерна математика. Оптимізація обчислень. – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2001. – Вып. 1. – С. 376–384.
- [71] Стецюк П.И. Об ускорении сходимости методов эллипсоидов // Труды XII Байкальской международной конференции (Иркутск, Байкал, 24 июня – 1 июля 2001 г.). Том 1. Математическое программирование. – Иркутск, 2001. – С. 61–66.
- [72] Стецюк П.И. Про одну модифікацію методу еліпсоїдів // Пр. міжнар. школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2002. – С. 64.
- [73] Стецюк П.И., Буханцов Д.М. К ускорению метода эллипсоидов с помощью использования шарового слоя // Зб. тез міжнар. конф. "Обчислювальна та прикладна математика", присвяченої 80-річчю академіка І.І.Ляшка (9.09.–10.09.2002). – Київ, 2002. – С. 94.

- [74] Стецюк П.И., Буханцов Д.М. К ускорению метода эллипсоидов с помощью использования шарового слоя // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины. – 2002. – № 1. – С. 63–70.
- [75] Стецюк П.И. Модификация метода эллипсоидов // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. Научное издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – №10. – С. 216-217.
- [76] Стецюк П.И. Приближенный метод эллипсоидов // Кибернетика и системный анализ. – 2003. – №3. – С. 141–146.
- [77] Стецюк П.И. Об одном эллипсоиде для внешней аппроксимации n -мерного полушара // Компьютерная математика. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. – Вып. 2. – С. 144–151.
- [78] Стецюк П.И., Колесник Ю.С., Березовский О.А. Об одном методе нахождения L_p -решения системы линейных уравнений // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2003. – № 2. – С. 83–90.
- [79] Стецюк П.И., Мица А.В. О вычислении градиента в задаче синтеза оптических покрытий // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2004. – № 3. – С. 127–133.
- [80] Стецюк П.И., Мица О.В. До використання методів першого порядку в задачах оптимізації багатосферних оптичних плівок // Пр. II-ої міжнар. школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2004. – С. 88.
- [81] Стецюк П.И., Мица А.В. О задачах оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – №4. – С. 107–115.
- [82] Стецюк П.И. О функционально избыточных ограничениях для булевых оптимизационных задач квадратичного типа // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – №6. – С. 168–172.
- [83] Стецюк П.И. Новые модели квадратичного типа для задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Кибернетика и системный анализ. – 2006. – №1. – С. 63–75.

- [84] Стецюк П.И., Березовский О.А. Лагранжевые оценки для максимального разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – № 5. – С. 31–38.
- [85] Стецюк П.И., Пардалос П.М. Об уточнении лагранжевых двойственных оценок в бинарных и булевых квадратичных задачах // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – № 5. – С. 145–153.
- [86] Стецюк П.И., Пардалос П.М., Крошко Д.Л. О новых лагранжевых двойственных оценках для числа устойчивости графа // Компьютерная математика. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2006. – Вып. 3. – С. 149–158.
- [87] Стецюк П.И. Об уточнении верхних оценок Н.З. Шора для числа независимости неориентированного графа // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. Научное издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2007. – № 11.
- [88] Стецюк П.И., Бутенко С.И., Березовский О.А. Об одной верхней оценке для взвешенного числа устойчивости графа // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2007. – №6. – С. 80–89.
- [89] Стецюк П.И., Чумаков Б.М. О свойствах одной верхней оценки Н.З. Шора для взвешенного числа устойчивости графа // Пр. міжнар. симп. "Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXIII)". – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2007. – С. 271–272.
- [90] Стецюк П.И. О новых свойствах оценок Шора для взвешенного числа устойчивости графа // Пр. міжнар. конф. "50 років Інституту кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України". – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2008. – С. 164–173.
- [91] Стецюк П.И., Бутенко С.И., Лиховид А.П. ЛП-ориентированная верхняя оценка для числа устойчивости графа на основе p -колес // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2008. – №7. – С. 34–44.

- [92] Стецюк П.И. Оценка Шора для взвешенного числа устойчивости W_p -совершенных графов // Матер. междунар. науч. конф. "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии". – Кишинэу: Академия транспорта, информатики и коммуникаций, – 2008. – С. 112–121.
- [93] Стецюк П.И., Пилиповский А.В. Математическая модель оптимальной загрузки мощностей энергосистемы с учетом их маневренности // Пр. IV-ої міжнар. школи-семінару "Теорія прийняття рішень". – Ужгород: УжНУ, 2008. – С. 159.
- [94] Стецюк П.И. Субградиентные методы переменной метрики, использующие шаг Агмона-Моцкина и одноранговый эллипсоидальный оператор // Труды АТИК. – 2007–2008. – Кишинэу: Эврика, 2009. – I (XII). – С. 16–25.
- [95] Стецюк П.И., Лиховид А.П. Об ЛП-ориентированных верхних оценках для взвешенного числа устойчивости графа // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – № 1. – С. 157–170.
- [96] Стецюк П.И., Лиховид А.П., Пилиповский А.В. Задачи оптимизации для выбора электрических нагрузок в энергосистеме // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2009. – №8. – С. 136–141.
- [97] Стецюк П.И., Лиховид А.П., Пилиповский А.В. О решении одного класса оптимизационных задач нахождения нагрузок энергетических объектов с помощью NEOS-программ // Пр. міжнар. симпоз. "Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXV)". – Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України, 2009. – 2. – С.350–354.
- [98] Стецюк П.И., Ляшко В.И., Нурминский Е.А. Точная ЛП-оценка для взвешенного числа устойчивости t -совершенных графов // Журн. обчислювальної та прикладної математики. – 2009. – № 3(99). – С. 106–115.
- [99] Стецюк П.И., Нурминский Е.А. Негладкий штраф и субградиентные алгоритмы для решения задачи проекции на политоп // Кибернетика и системный анализ. – 2010. – №1. – С. 59–63.

- [100] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б., Пилиповский А.В. О задаче оптимального соотношения между спросом и добавленной стоимостью в моделях Леонтьева // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2010. – №9. – С. 136–143.
- [101] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Оптимальная нормированная структура спроса и добавленной стоимости в продуктивной модели Леонтьева // Кибернетика и системный анализ. – 2010. – №5. – С. 51–59.
- [102] Стецюк П.И., Золотых Н.Ю. Бинарный квадратичный многогранник и его аппроксимации // Журн. обчислювальної та прикладної математики. – 2010. – №2(101). – С. 76–86.
- [103] Стецюк П.И. Оценки Н.З. Шора в квадратичных экстремальных задачах и их применение в комбинаторной оптимизации // Матер. Российской конф. "Дискретная оптимизация и исследование операций". – Новосибирск: Ин-т математики, 2010. – С. 60–64.
- [104] Стецюк П.И. Оценки Шора в квадратичных экстремальных задачах // Матер. междунар. научн. конф. "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии". – Кишинэу: Академия транспорта, информатики и коммуникаций. – 2010. – С.19–25.
- [105] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одной экстремальной задаче для связи прямой и двойственной моделей Леонтьева // XXI ежегодная междунар. конф. (KROMSH–2010). – Севастополь: КНЦ НАНУ, 2010. – с. 56.
- [106] Стецюк П.И. Метод msg2p для овражных выпуклых функций // Информационный бюллетень Ассоциации математического программирования. № 12. Научное издание. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – С.57–58.
- [107] Стецюк П.И. Релаксационный субградиентный метод минимизации овражных выпуклых функций // Пробл. теоретической кибернетики. Матер. XVI междунар. конф. (Нижний Новгород, 20–25 июня 2011 г.) / Под ред. Ю.И.Журавлева. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2011. – С. 449–453.

- [108] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одной экстремальной задаче для связи прямой и двойственной моделей Леонтьева // Спектральные и эволюционные задачи. – 2011. – 2. – №2. – С. 164–169.
- [109] Стецюк П.И., Бондаренко А.В. О спектральных свойствах модели Леонтьева // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, – 2011. – №10. – С. 84–90.
- [110] Стецюк П.И. Субградиентные методы с преобразованием пространства для минимизации овражных выпуклых функций // Тез. докл. междунар. конф. „Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика“, посвященной 90-летию со дня рождения академика Н.Н. Яненко. — Новосибирск: Академгородок, 2011. — С. 57.
- [111] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одной оптимизационной задаче для моделей Леонтьева // XXII ежегодная междунар. конф. (KROMSH-2011). (Крым, Севастополь, 18–29 сентября 2011). – Севастополь: КНЦ НАНУ, 2011. – С. 51.
- [112] Стецюк П. И. О спектральных свойствах матриц Леонтьева // Сб. тр. Всерос. конф. „Статистика. Моделирование. Оптимизация“ (Челябинск, 28 ноября – 3 декабря 2011 г.). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – Р. 173–178.
- [113] Стецюк П.И. Ускоренные по Шору модификации субградиентного метода Поляка // Матер. 3-й междунар. науч. конф. „Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии“, (Кишинэу, 19–23 марта 2012 г.). – Кишинэу: Эврика, 2012. – С. 509–519.
- [114] Стецюк П.И. Ускорение субградиентного метода Поляка // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, – 2012. – №11. – С. 151–160.
- [115] Стецюк П.И. Ускоренные модификации субградиентного метода Поляка для овражных выпуклых функций // Стохастическое программирование и его приложения / Под ред. П.С. Кнопова, В.И. Зоркальцева, Я.М. Иваньо. – Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. – С. 160–184.

- [116] Стецюк П.И. Оптимальные нормированные векторы конечного продукта и добавленной стоимости в продуктовой модели Леонтьева // Стохастическое программирование и его приложения / Под ред П.С. Кнопова, В.И. Зоркальцева, Я.М. Иваньо. — Иркутск: Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, 2012. — С. 483–492.
- [117] Стецюк П.И., Кошлай Л.Б. Об одном субградиентном методе с преобразованием пространства // XXIII ежегодная междунар. конф. (KROMSH-2011). (Крым, Севастополь, 17–29 сентября 2012). — Севастополь: КНЦ НАНУ, 2012.
- [118] Стецюк П.И., Журбенко М.Г., Лиховид О.П. Математичні моделі та програмне забезпечення в задачах енергетики. — Київ: ПП "Ательє "Поліграфічний комплекс", 2012. — 64 с.
- [119] Хачиян Л.Г. Полиномиальный алгоритм в линейном программировании // Докл. АН СССР. — 1979. — **244**. — № 5. — С. 1093–1096.
- [120] Хачиян Л.Г. Полиномиальные алгоритмы в линейном программировании // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. — 1980. — **20**. — № 1. — С. 51–68.
- [121] Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. — М.: Мир, 1975. — 535 с.
- [122] Шарый С.П. Разрешимость интервальных линейных уравнений и анализ данных с неопределенностями // Автоматика и телемеханика. — 2012. — №2. — С. 111–125.
- [123] Шор Н.З. Применение метода градиентного спуска для решения сетевой транспортной задачи // Матер. науч. семинара по теорет. и прикл. вопр. кибернетике и исследования операций: Науч. совет по кибернетике АН УССР. — Киев, 1962. — Вып. 1. — С. 9–17.
- [124] Шор Н.З. Обобщенный градиентный спуск // Труды I Зимней школы по математическому программированию (Дрогобыч). — М.: ЦЭМИ АН СССР, 1969. — Вып. 3. — С. 578–585.
- [125] Шор Н. З., Билецкий В. И. Метод растяжения пространства для ускорения сходимости в задачах овражного типа // Тр. семинара Науч. совета АН УССР по кибернетике «Теория оптимальных решений». — Киев:

- Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины. – 1969. – № 2. – С. 3–18.
- [126] Шор Н.З. Использование операции растяжения пространства в задачах минимизации выпуклых функций // Кибернетика. – 1970. – № 1. – С. 6–12.
- [127] Шор Н.З., Журбенко Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов // Кибернетика. – 1971. – № 3. – С. 51–59.
- [128] Шор Н.З. Метод отсечения с растяжением пространства для решения задач выпуклого программирования // Кибернетика. – 1977. – № 1. – С. 94–95.
- [129] Шор Н.З. Новые направления в развитии методов негладкой оптимизации // Кибернетика. – 1977. – № 6. – С. 87–91.
- [130] Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. – Киев: Наукова думка, 1979. – 200 с.
- [131] Шор Н.З., Гершович В.И. Об одном семействе алгоритмов для решения задач выпуклого программирования // Кибернетика. – 1979. – № 4. – С. 62–67.
- [132] Шор Н.З., Давыдов А.С. О методе получения оценок в квадратичных экстремальных задачах с булевыми переменными // Кибернетика. – 1985. – № 2. – С. 48–50.
- [133] Шор Н.З. Квадратичные оптимизационные задачи. – Известия АН СССР. Техническая кибернетика. – 1987. – № 1. – С. 128–139.
- [134] Шор Н.З. Об одном подходе к получению глобальных экстремумов в полиномиальных задачах математического программирования // Кибернетика. – 1987. – № 5. – С. 102–106.
- [135] Шор Н.З. Об одном классе оценок глобального минимума полиномиальных функций // Кибернетика. – 1987. – № 6. – С. 9–11.
- [136] Шор Н.З., Стеценко С.И. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. – Киев: Наукова думка, 1989. – 208 с.

- [137] Шор Н.З., Соломон Д.И. Декомпозиционные методы в дробно-линейном программировании. – Кишинев: Штиинца, 1989. – 204 с.
- [138] Шор Н.З., Березовский О.А. Новые алгоритмы решения задачи о максимальном разрезе неориентированного графа // Кибернетика и системный анализ. – 1995. – № 2. – С. 100–106.
- [139] Шор Н.З. Минимизация матричных функций и недифференцируемая оптимизация // Обзорение прикладной и промышленной математики. – 1995. – 2. – С. 113–138.
- [140] Шор Н.З., Стецюк П.И. Использование модификации r -алгоритма для нахождения глобального минимума полиномиальных функций // Кибернетика и системный анализ. – 1997. – № 4. – С. 28–49.
- [141] Шор Н.З., Стецюк П.И. Использование r -алгоритма в задачах полуопределенного программирования // Пр. міжнар. конф. "Питання оптимізації обчислень" (6–8 жовтня 1997 р., м. Київ). – С. 330–335.
- [142] Шор Н.З. Роль избыточных ограничений в улучшении двойственных оценок для полиномиальных оптимизационных задач // Кибернетика и системный анализ. – 1998. – № 4. – С. 106–121.
- [143] Шор Н.З., Стецюк П.И., Крылов С.В. Нахождение глобальных минимумов полиномиальных функций с использованием двойственных квадратичных оценок // Вестник Международного Соломонова университета. – 2000. – № 4. – С. 217–233.
- [144] Шор Н.З., Журбенко Н.Г., Лиховид А.П., Стецюк П.И. Развитие алгоритмов недифференцируемой оптимизации и их приложения // Кибернетика и системный анализ. – 2003. – № 4. – С. 80–94.
- [145] Шор Н.З., Стецюк П.И., Березовский О.А. Двойственные оценки для специальной оптимизационной задачи квадратичного типа на многообразии Штифеля // Теория оптимальных решений. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, 2004. – С. 3–10.
- [146] Шор Н.З., Стецюк П.И., Березовский О.А. Нахождение оценок глобального экстремума в задачах на многообразии Штифеля // Матер. 11-й междунар. конф. по автоматическому управлению „Автоматика-2004“

- (27–30 сентября, 2004). – Киев: Национальный университет пищевых технологий, 2004. – 1. – С. 47.
- [147] Шор Н.З. Методы недифференцируемой оптимизации и сложные экстремальные задачи: Сб. избр. тр. – Кишинэу: Эврика, 2008. – 270 с.
- [148] Шор Н.З. Методы минимизации негладких функций и матричные задачи оптимизации: Сб. избр. тр. – Кишинэу: Эврика, 2009. – 240 с.
- [149] Юдин Д.Б., Немировский А.С. Информационная сложность и эффективные методы решения выпуклых экстремальных задач // Экономика и мат. методы. – 1976. – Вып. 2. – С. 357–359.
- [150] Achterberg T. Constraint Integer Programming, Technische Universität Berlin, 2007, <http://opus.kobv.de/tuberlin/volltexte/2007/1611/>
- [151] Agmon S. The relaxation method for linear inequalities // Canadian J. of Mathematics. – 1954. – 6. – P. 382–392.
- [152] Ahuja R.K., Magnanti T.L., Orlin J.B. Network flows: Theory, algorithms, and applications. – Prentice-Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1993.
- [153] Artin E. Ueber die Zerlegung definiten Functionen in Quadrate // Hamburg Abh. – 1927. – № 5. – P. 100–115.
- [154] Balinski M.L., Wolfe P. (eds.) Nondifferentiable optimization. Math. Programming Study, 3. – Amsterdam: North-Holland, 1975. – 178 p.
- [155] Balogh J., Csendes T., Rapcsak T. Global optimization problems on Stiefel manifold // NMCM-2002 Book of Abstracts, Miskolc, Hungary, 2002. – P. 19–21.
- [156] Balogh J., Csendes T., Rapcsak T. Some global optimization problems on Stiefel manifold // J. of Global Optimization. – 2004. – 30. – P. 91–101.
- [157] Barahona F., Mahjoub A.R. On the cut polytope // Math. Program, – 1986. – 36. – P. 157–173.
- [158] Bauschke H., Borwein J.M. On projection algorithms for solving convex feasibility problems // SIAM Rev. – 1996. – 38(3). – P. 367–426.
- [159] Bachem A., Grötschel M., Korte B. (eds.) Mathematical Programming: the state of art, Bonn, 1982. – Berlin: Springer-Verlag, 1983. – 655 p.

- [160] Bomze I.M., de Klerk E. Solving Standard Quadratic Optimization Problems via Linear, Semidefinite and Copositive Programming // J. of Global Optimization. – 2002. – 24. – P. 163–185.
- [161] Bortis H. Keynes and the Classics: Notes on the Monetary Theory of Production, in: Modern Theories of Money. The Nature and Role of Money in Capitalist Economies, Rochon L.-P. and Sergio Rossi (eds). – Edward Elgar: UK, USA, 2003. – P. 411–474.
- [162] Boyd S., Vandenberghe L. Convex Optimization. – Cambridge University Press. – 2004. – 730 p.
- [163] Camerini P., Fratta L., Maffioli F. On improving relaxation methods by modified gradient techniques // Math. Program. – 1975. – Study 3. – P. 26–34.
- [164] Censor Y., Jiang M., Louis A.K. (Eds.) Mathematical Methods in Biomedical Imaging and Intensity-Modulated Radiation Therapy (IMRT)// Series: Publications of the Scuola Normale Superiore Subseries: CRM Series, 2008. – 7. – 526 p.
- [165] Cheng E. and Cunningham W.H. Wheel inequalities for stable set polytopes // Math. Program. – 1997. – **77**. – № 3. – P. 389–421.
- [166] Cherkassky B.V., Goldberg A.V., Radzik T. Shortest Paths Algorithms: Theory and Experimental Evaluation // Math. Program. – 1996. – 73. – P. 129–174, <http://www.avglab.com/andrew/soft.html>
- [167] Corliss G.F., Kearfott R.B. Rigorous global search: Industrial applications. – In: T. Csendes (ed.): Development in Reliable Computing. – Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, 1999. – P. 1–16.
- [168] Delorme C., Poljak S. Laplacian eigenvalues and the maximum cut problem // Math. Program. – 1993. – 62. – P. 557–574.
- [169] DIMACS (1995), Cliques, coloring, and satisfiability: second DIMACS implementation challenge, <http://dimacs.rutgers.edu/Challenges/>
- [170] Fourer R., Gay B.M., Kernighan B.W. A Modeling Language for Mathematical Programming // Management Science. – 1990. – 36. – P. 519–554.

- [171] Frieze A., Jerum M. Improved approximation algorithms for max k-cut and max bisection. – Reprint, Carnegie Mellon University, 1995. – P. 1–17.
- [172] Furman S.A., Tikhonravov A.V. Basics of optics of multiplayer systems. – Editions Frontiers, Gif-sur Yvette, 1992. – 242 p.
- [173] Goemans M.X., Williamson D.P. 0.878-Approximation algorithms for MAX-CUT and MAX2SAT // Proceedings of the 26th Annual ACM Symposium on Theory of Computing. – 1994. – P. 422–431.
- [174] Grötschel M., Lovász L., Schrijver A. The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization // Combinatorica. – 1981. – 1(2). – P. 169–197.
- [175] Grötschel M., Lovász L., Schrijver A. Geometric algorithms and combinatorial optimization. – Berlin: Springer-Verlag, 1988. – 362 p.
- [176] Hilbert D. Ueber die Darstellung definiter Formen als Summen von Formen quadraten, Math. Ann. – Leipzig, 1888. – Bd. 22. – P. 342–350.
- [177] Hu T.C. Integer programming and network flows. — California: Addison Wesley Publishing Company, 1970.
- [178] Kappel F., Kuntsevich A.V. An implementation of Shor's r-algorithm // Computational Optimization and Applications. – 2000. – 15. – P. 193–205.
- [179] Kearfott R.B. Rigorous Global Search: Continuous Problems. – Boston, Dordrecht, London: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [180] Kelley J.E. The cutting plane method for solving convex programs // J. Soc. for Industr. and Appl. Math. – 1960. – 8. – №4. – P. 703–712.
- [181] de Klerk E., Pasechnik D. Approximation of the stability number of a graph via copositive programming // SIAM J. of Optimization. – 2002. – 12(4). – P. 875–892.
- [182] König H., Pallaschke D. On Khachian's algorithm and minimal ellipsoids // Numerische Mathematik. – 1981. – 36. – P. 211–223.
- [183] Kurz H.D. Who is going to kiss sleeping beauty? on the 'classical' analytical origins and perspectives of input-output analysis // Review of Political Economy. – 2011. – 23(1). – P. 25–47.

- [184] Laurent M., Rendl F. Semidefinite programming and integer programming. – Rep. CWI, PNA-R0210. – Amsterdam, 2002. – 91 p.
- [185] Lemarechal C. Numerical experiments in nonsmooth optimization // In: Progress in nondifferentiable optimization /Ed. E. A. Nurminski. CP-82-58. – Laxenburg: International Institute for Applied System Analysis, 1982. – P. 61–68.
- [186] Lovasz L. On the Shannon capacity of a graph // IEEE Trans. Inform. Theory. – 1979. – 25. – P. 1–7.
- [187] Lykhovyd O., Stetsyuk P. On numerical experiments with two LP-oriented upper bounds for the stability number of a graph // Abstracts of International Conference "Discrete and Global Optimization"(July 31 – August 2, 2008, Yalta, Ukraine).
- [188] Motzkin T., Schoenberg I.J. The relaxation method for linear inequalities // Canadian J. of Mathematics. – 1954. – 6. – P. 393–404.
- [189] Nesterov Y. Efficiency of coordinate descent methods on huge-scale optimization problems // CORE Discussion Paper #2010/2, 2010. – 23 p.
- [190] Nesterov Yu., Nemirovskii A. Interior Point Polynomial Algorithm in Convex Programming. – SIAM. – 1994. – 406 p.
- [191] Nurminski E.A., Stetsyuk P.I. Nonsmooth optimization and projection problem // II International Conference "Optimization and Applications (OPTIMA-2011), Abstracts (Petrovac, Montenegro, September 25 – October 2, 2011). – М.: Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, 2011. – С. 167–168.
- [192] Padberg M.W. The boolean quadratic polytope: some characteristics, facets and relatives // Math. Program. – 1989. – 45. – P. 139–172.
- [193] Pardalos P., Rendl F., Wolkowicz H. The quadratic assignment problem: A survey and recent development. // Proceedings of the DIMACS Workshop on Quadratic Assignment Problems, AMS, 1994. – P. 1–41.
- [194] Rapcsak T. On minimization on Stiefel manifold // European J. of Operation Research, 2002. – 143. – P. 365–376.

- [195] Schrijver A. A Comparison of the Delsarte and Lov'asz bounds // IEEE Trans. Inform. Theory. – 1979. – 25(4). – P. 425–429.
- [196] Schrijver A. Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency. – Berlin: Springer-Verlag, 2003. – 1881 p.
- [197] Shor N.Z. Dual Estimates in Multiextremal Problems // Journal of Global Optimization. – 1992. – № 2. – P. 411–418.
- [198] Shor N.Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. – Boston; Dordrecht; London: Kluwer Academic Publishers, 1998. – 412 p.
- [199] Shor N. Z., Stetsyuk P.I. Dual Solution of Quadratic-Type Problems by r -algorithm (subroutine DSQTPPr) // Abstracts of Second International Workshop "Recent Advances in Non-Differentiable Optimization"(October, 1–4, 2001, Kyiv, Ukraine). – P. 36.
- [200] Shor N.Z., Stetsyuk P.I. Lagrangian bounds in multiextremal polynomial and discrete optimization problems // J. of Global Optimization. – 2002 – 23. – P. 1–41.
- [201] Shor N., Stetsyuk P. Quadratic-type models and upper bounds for the problems of finding the maximum weighted independent set in graphs // Conference on Systems Analysis, Data Mining and Optimization in Biomedicine, February 2–4, 2005, University of Florida, Gainesville, FL.
- [202] Stetsyuk P. Method FEG2P1 to Find ε -Solutions of Convex Inequalities // Thesis of U.S.–Ukrainian Workshop "Recent Advances in Non-Differentiable Optimization"(May, 15–18, 2000, Kyiv, Ukraine). – P. 36.
- [203] Stetsyuk P.I. On one interesting ellipsoid // Междунар. конф., посвященная 65-летию со дня рождения Б.Н.Пшеничного. Тезисы докладов (Июнь 25–28, 2002, Киев, Украина). – Киев: НТТУ "КПИ", 2002. – С. 53–54.
- [204] Stetsyuk P.I., Bardadym T.O. The Use of Odd Sets of Variables to Improve Bounds in Boolean Quadratic Problems // Abstracts of International Conference in Honor of the 70th Birthday of Academician I.V.Sergienko „Applied Optimization and Metaheuristic Innovations“ (July 19–21, 2006, Yalta, Ukraine). – P. 51.

- [205] Stetsyuk P. On interesting properties of Shor's upper bounds for weighted stability number of a graph. // Abstracts of International Conference "Discrete and Global Optimization"(July 31 – August 2, 2008, Yalta, Ukraine).
- [206] Stetsyuk P., Nurminski E. On a modification of ellipsoid method // Матер. междунар. науч. конф. "Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии"(24–26 марта 2010). – Кишинэу: Академия транспорта, информатики и коммуникаций. – С. 37–42.
- [207] Stetsyuk P. Polyak's accelerated subgradient method // 10th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization, 5–7 July 2012, Siauliai, Lithuania. – P. 53.
- [208] Stetsyuk P. On one nonlinear optimization problem for Leontief models // 25th European Conference on Operational Research, 8–11 July 2012. Vilnius, Lithuania. – P. 141.
- [209] Todd M.J. On minimum volume ellipsoids containing part of a given ellipsoid // Math. of Oper. Res. – 1982. – 7. – P. 253–261.
- [210] Wunderling R. Paralleler und objektorientierter Simplex-Algorithmus, Technische Universität Berlin, 1996, <http://www.zib.de/Publications/abstracts/TR-96-09/>