Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

ПЕРЕТЯТЬКО АНАСТАСІЯ СЕРГІЇВНА

УДК 519.85

НАПІВВИЗНАЧЕНА ОПТИМІЗАЦІЯ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАГАЛЬНИХ КВАДРАТИЧНИХ ЗАДАЧ

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2015

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Державному вищому навчальному закладі «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпропетровськ, Міністерство освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор,
Косолап Анатолій Іванович,
професор кафедри спеціалізованих комп’ютерних систем,
Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпропетровськ.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор,
Ємець Олег Олексійович,
завідувач кафедрою математичного моделювання та соціальної інформатики,
Полтавський університет економіки і торгівлі, м. Полтава;

кандидат фізико-математичних наук, доцент,
Сидоров Максим Вікторович,
доцент кафедри прикладної математики,
Харківський національний університет радіоелектроніки, м. Харків.

Захист відбудеться “*08*” *грудня* 2015 р. о *13* годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д.64.052.02 у Харківському національному університеті радіоелектроніки за адресою: 61166, м. Харків, пр. Леніна, 14.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Харківського національного університету радіоелектроніки за адресою: 61166, м. Харків, пр. Леніна, 14.

Автореферат розісланий “*05*” *листопада* 2015 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
кандидат технічних наук, доцент Л.В. Колесник

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Оптимізаційні моделі складних систем в галузях ринкової економіки, фінансів, планування, управління проектами, штучному інтелекті, оптимальному проектуванні, хімічних технологіях, комп'ютерних системах призводять до необхідності розв'язування задач, які можна представити у вигляді загальних квадратичних задач. Задача скінченновимірної мінімізації квадратичної функції при квадратичних обмеженнях має ефективний розв'язок, якщо цільова функція і обмеження – опуклі. Якщо ж принаймні одна з функцій не є опуклою, то така задача стає достатньо складною і в загальному випадку багатоекстремальною. Наразі для розв'язування таких задач не існує поліноміальних методів. Методи гілок та границь потребують експоненціального часу для знаходження змінних моделей і тому можуть бути використані тільки для розв'язування задач невеликої розмірності. Методи випадкового пошуку іноді дозволяють знайти оптимальні розв'язки, але перевірка цієї оптимальності потребує експоненціального часу. Прогрес в математичному моделюванні складних систем можливий тільки з запровадженням нових методів, які дозволять ефективно розв'язувати класи складних оптимізаційних задач. Пошуку таких методів присвячена велика кількість публікацій. Значний вклад в математичне моделювання та обчислювальні методи внесли вчені Н. З. Шор, Б. Н. Пшеничний, І. В. Сергієнко, Ю. Г. Стоян, О. О. Ємець, В. І. Норкін, О. М. Литвин, С. І. Ляшко, А. І. Косолап, В. Ф. Демьянов, А. А. Самарський та інші.

Новим напрямом досліджень в оптимізації складних систем є напіввизначене програмування (напіввизначена оптимізація). Бурхливий розвиток цієї галузі у 90-х роках минулого століття був мотивований відкриттям нових прикладних задач напіввизначеної оптимізації в окремих областях, у поєднанні з розробкою нових методів. На даний момент найефективнішими вважаються методи внутрішньої точки, але й ці методи мають недоліки. Вони значно збільшують розмірність початкової задачі, обмежені використанням тільки для задач з нульовим розривом двоїстості, вимагають лінійну незалежність обмежень. Однак прикладні задачі SDP потребують розробки більш ефективних методів. Були спроби узагальнення симплекс-методу для задач напіввизначеної оптимізації, але вони мали тільки теоретичний інтерес. Тому пошуки більш ефективних методів тривають. Значний внесок в напіввизначене програмування зробили англомовні вчені L. Vandenberghe, S. P. Boyd, Y. E. Nesterov, A. S. Nemirovskii, F. Alizadeh, M. J. Todd, C. Helmberg, B. Borchers, Y. Ye, а також Н. З. Шор, А. І. Косолап, В. Г. Жадан.

Вдосконалення потребує й напіввизначена релаксація, яка дозволяє знаходити нижні оцінки цільової функції в загальних квадратичних задачах або точку глобального мінімуму з заданою точністю. Причому перевірка оптимальності знайденого розв'язку не потребує експоненційного часу та є досить простою. Таким чином, напіввизначена релаксація значно розширює сферу використання напіввизначеної оптимізації. Її альтернативою при розв'язанні загальних квадратичних задач є двоїстий метод, запропонований Н. З. Шором, але двоїста задача є негладкою та досить складною.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась у відповідності з планами наукових досліджень Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет» в рамках наукової теми “Дослідження шляхів використання інформаційних та комп’ютерних технологій при вирішенні регіональних проблем” (№ держреєстрації 0112U004341, 2012-2014 рр.), де дисертант була автором розділів «3.8 Задача кластеризації даних» і «3.9 Задача розміщення сенсорних датчиків у мережі», в яких використані результати дисертації для розв’язання прикладних задач.

Мета і завдання дослідження. *Мета роботи* – обґрунтування збіжності та вдосконалення напіввизначеного симплекс-методу для розв’язування задач напіввизначеної оптимізації, застосування та удосконалення напіввизначеної релаксації для розв’язування прикладних задач квадратичної оптимізації (задач з булевими змінними, задачі кластеризації даних, задачі розміщення сенсорних датчиків у мережі, задачі пошуку максимального розрізу графа (max-cut)).

Для досягнення поставленої мети потрібно розв’язати такі *завдання*:

– удосконалити напіввизначений симплекс-метод для розв’язування задач напіввизначеної оптимізації, що ґрунтується на симплекс-методі для розв’язування задач лінійної оптимізації, дослідити його збіжність та засоби її прискорення, визначити його теоретичні та практичні переваги;

– удосконалити напіввизначену релаксацію для розв’язування загальних квадратичних задач і прикладних задач, які можуть бути описані квадратичними оптимізаційними моделями, для отримання кращих оцінок цільової функції;

– розглянути сфери застосування напіввизначеної оптимізації;

– виконати чисельні експерименти для перевірки ефективності напіввизначеної релаксації для оптимізаційних моделей різних класів прикладних задач квадратичної оптимізації.

Об’єкт дослідження – задачі напіввизначеної оптимізації та методи їх розв’язування.

Предмет дослідження – напіввизначена релаксація загальних квадратичних задач і застосування напіввизначеного симплекс-методу для розв’язування релаксованих задач.

Методи дослідження. При розв’язуванні поставлених задач використовувалася багатовимірна евклідова геометрія, опуклий аналіз, математичне моделювання, теорія та чисельні методи оптимізації. Для розв’язування загальних квадратичних задач використовувався метод напіввизначеної релаксації, точна квадратична регуляризація, напіввизначений симплекс-метод та прямо-двоїстий метод внутрішньої точки.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в обґрунтуванні та удосконаленні напіввизначеного симплекс-методу як альтернативи існуючим прямо-двоїстим методам внутрішньої точки для розв’язування задач напіввизначеної оптимізації. Це розширило межі ефективного використання математичного моделювання складних систем, зокрема тих систем, які описуються загальними квадратичними функціями. Зокрема, в дисертації:

– *удосконалено* процедуру оберненої ітерації, яка використовується для визначення додатної напіввизначеності матриці, шляхом використання методу спряжених напрямів, що за результатами чисельних експериментів дозволило підвищити точність розрахунків і прискорити збіжність до власного вектора матриці;

– *уперше строго доведено* збіжність напіввизначеного симплекс-методу, який вдосконалено процедурою оберненої ітерації з використанням спряжених напрямів, встановлено його теоретичні та чисельні переваги;

– *удосконалено* напіввизначену релаксацію шляхом використання точної квадратичної регуляризації та інших перетворень для загальних квадратичних задач і широкого кола прикладних задач (задачі розміщення сенсорних датчиків у мережі, задачі кластеризації даних, квадратичних задач з булевими змінними, задачі max-cut), що на відміну від існуючих методів дозволило знаходити кращі розв'язки початкової задачі;

– *доведено точність* напіввизначеної релаксації для окремих класів задач максимізації евклідової норми вектора на опуклій множині;

– *уперше запропоновано* та перевірено на практиці нову процедуру знаходження верхніх і нижніх оцінок цільової функції, яка дозволяє отримувати оптимальні розв'язки у загальних задачах квадратичної оптимізації.

Практичне значення одержаних результатів. Удосконалений напіввизначений симплекс-метод може бути використаний для розв'язування широкого кола практичних задач. Зокрема, задач кластеризації даних, розміщення датчиків у мережі, в алгоритмах калібрування фотокамер, для розфарбування графів та інших. Розроблене програмне забезпечення для розв'язування задач напіввизначеної оптимізації реалізує два найбільш популярних та ефективних методи (прямо-двоїстий метод внутрішньої точки та напіввизначений симплекс-метод), ефективність яких перевірена за допомогою чисельних експериментів над задачами різної розмірності. Практичне значення отриманих результатів підтверджується актом про впровадження результатів дисертаційної роботи у навчальний процес Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет».

Особистий внесок здобувача. Всі результати дисертаційної роботи отримано автором особисто та опубліковано в роботах [1 – 18]. У роботах, опублікованих у співавторстві, дисертанту належать такі результати: у [7] вперше використала метод спряжених напрямів у процедурі оберненої ітерації для визначення додатної напіввизначеності матриці; у [1, 10] уперше дала строге доведення збіжності напіввизначеного симплекс-методу; у [6, 13] удосконалила напіввизначений симплекс-метод шляхом використання методу спряжених напрямів у процедурі оберненої ітерації; у [1] встановила теоретичні та чисельні переваги напіввизначеного симплекс-методу; у [2, 3, 5, 9, 11, 16, 18] удосконалила напіввизначену релаксацію шляхом використання точної квадратичної регуляризації та інших перетворень; у [16] уперше довела точність напіввизначеної релаксації для окремих класів задач; у [4, 5, 17] уперше запропонувала та перевірила на практиці нову процедуру знаходження верхніх і нижніх оцінок цільової функції у загальних задачах квадратичної оптимізації.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи пройшли апробацію на міжнародних і всеукраїнських конференціях «Математичне та програмне забезпечення інтелектуальних систем» (Дніпропетровськ, 2009 р.), «Dynamical system modelling and stability investigation» (Київ, 2011 р.), «Математичне та імітаційне моделювання систем» (Чернігів, 2011-2013 рр.), «Обчислювальна та прикладна математика» (Київ, 2011 р., 2014 р.), «Інформатика та системні науки» (Полтава, 2012 р., 2014 р., 2015 р.), «Контроль і управління в складних системах» (Вінниця, 2012 р.), «Хімія та сучасні технології» (Дніпропетровськ, 2013 р.), «Современные проблемы математики и ее приложения в естественных науках и информационных технологиях» (Харків, 2013 р.), «Computer science & engineering» (Львів, 2013 р.), «Актуальные проблемы современной науки» (Уфа, 2013 р.).

Публікації. Основні результати дисертації опубліковано у 18 наукових роботах [1–18], з них 8 статей (7 – це статті у наукових журналах і збірниках наукових праць, які входять до переліку фахових видань України з фізико-математичних наук [1–7] (у тому числі одна стаття у Міжнародному науково-технічному журналі «Проблемы управления и информатики», який введений в базу даних Scopus [1]); 1 стаття в іноземному періодичному виданні [7]), 10 – матеріали наукових конференцій [9–18].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація включає перелік умовних позначень, вступ, чотири розділи, висновки за роботою, 3 додатки (на 19 с.), список використаних джерел з 171 найменування (на 20 с.). Загальний обсяг роботи складає 181 сторінку, включаючи 12 рисунків (5 с.) і 8 таблиць (4 с.).

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступній частині** обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та задачі дослідження, наведено новизну результатів дослідження, ступеня їх апробації та опублікування.

У **першому розділі** наведено основні відомості теорії та сучасних методів напіввизначеної оптимізації із зазначенням їх переваг і недоліків. Розглянуто застосування напіввизначеної релаксації для розв'язування різних класів задач квадратичної оптимізації. Здійснено огляд літературних джерел, пов'язаних з темою дисертації, та існуючого програмного забезпечення для розв'язування задач напіввизначеної оптимізації та її прикладних задач. Наведено основні положення симплекс-методу для задач лінійного програмування, які використано у напіввизначеному симплекс-методі, та методи знаходження власних значень матриці та відповідних їм власних векторів.

Пряма задача напіввизначеної оптимізації (SDP) розглядає проблему мінімізації лінійної функції $C \bullet X$ змінних X:

$$\min\left\{ C \bullet X \mid A_i \bullet X = b_i,\ \ i = 1,\ldots,m,\ \ X \succeq 0 \right\}, \tag{1}$$

де C та всі A_i ($i = 1,\ldots,m$) – симетричні матриці ($n \times n$); b_i ($i = 1,\ldots,m$) – скаляр; X – симетрична додатно напіввизначена матриця ($n \times n$). Позначення $C \bullet X$ означає скалярний добуток двох матриць: $C \bullet X = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_{ij}$.

Двоїстою задачею напіввизначеного програмування (SDD) до задачі SDP (1) є задача $\max\left\{ b^T y \mid \sum_{i=1}^{m} A_i^T y_i + Z = C,\ Z \succeq 0 \right\}$, де C та A_i – симетричні матриці ($n \times n$, $i = 1,\ldots,m$); b – вектор-стовпчик розмірності m; y – вектор-стовпчик розмірності m, де $y_1, \ldots, y_m$ – двоїсті змінні – компоненти вектора y; Z – симетрична додатно напіввизначена матриця (вільна змінна). На відміну від задач лінійного програмування, в задачах напіввизначеної оптимізації розрив двоїстості може бути більше нуля навіть у тому випадку, коли пряма і двоїста задачі мають розв'язок.

У **другому розділі** для визначення додатної напіввизначеності матриці X у задачі (1) запропонована модифікована процедура оберненої ітерації з використанням методу спряжених напрямів. Від ефективного розв'язання цієї задачі залежить ефективність кожного методу напіввизначеної оптимізації. Удосконалено напіввизначений симплекс-метод шляхом використання методу спряжених напрямів у процедурі оберненої ітерації та строго обґрунтовано його збіжність за допомогою теорем і лем. Встановлено теоретичні переваги напіввизначеного симплекс-методу над методами внутрішньої точки, наведено порівняльні чисельні експерименти напіввизначеного симплекс-методу з методами внутрішньої точки за допомогою власного програмного забезпечення та існуючих програмних пакетів для розв'язування задач SDP.

Симетрична матриця Q порядку n є додатно напіввизначеною, якщо $x^TQx \geq 0$, $\forall x$, або $\min\{x^TQx\} \geq 0$. Нормуємо вектор x та отримуємо задачу $\min\{x^TQx \,|\, \|x\|^2 = 1\}$. Розв'язок цієї задачі еквівалентний наступній:

$$\min\{x^TQx + r(\|x\|^2 - 1) \mid \|x\|^2 = 1\}. \qquad (2)$$

Оберемо таке значення $r > 0$, при якому матриця $Q^* = Q + rI$ буде додатно визначеною, а цільова функція задачі (2) стане опуклою. Розв'язком задачі (2) є власний вектор, що відповідає мінімальному власному значенню матриці Q. Таким чином, задача зводиться до пошуку власного вектора матриці Q^*. Це рівносильно розв'язуванню задачі

$$\min\{x^TQ^*x \mid \|x\|^2 = 1\}, \qquad (3)$$

або, враховуючи те, що власний вектор досить знайти з точністю до постійного множника, задачі

$$\max\{\|x\|^2 \mid x^TQ^*x = 1\}. \qquad (4)$$

У роботі сформульована і доведена наступна теорема.

***Теорема* 2.1.** *Розв'язок задачі* (3) *співпадає з розв'язком задачі* (4) *з точністю до постійного множника.*

Таким чином, для перевірки додатної напіввизначеності матриці Q достатньо знайти вказаний власний вектор x додатно визначеної матриці Q^* та перевірити умову $x^TQx \geq 0$. Якщо вона виконується, то матриця Q – додатно напіввизначена.

У роботі сформульована і доведена наступна теорема.

***Теорема* 2.2.** *Нехай* x^* *– розв'язок задачі* (4) *та* $x^{*T}Qx^* \geq 0$, *тоді матриця* Q *– додатно напіввизначена.*

Методом множників Лагранжа знаходимо k-е наближення розв'язку задачі (4) у вигляді $x^k = \dfrac{(Q^*)^{-k}x^0}{\sqrt{x^0(Q^*)^{-(2k-1)}x^0}}$. Ця рекурентна формула співпадає з формулою зворотної ітерації. Враховуючи, що задача (4) – квадратична, для прискорення збіжності методу зворотної ітерації використовуємо процедуру побудови спряжених напрямів. Два вектора x та z – спряжені, якщо $x^T Q^* z = 0$. Тепер у методі зворотної ітерації замість вектора x^{k+1} будемо брати його корекцію так, щоб новий вектор дорівнював $z^{k+1} = x^{k+1} - \alpha x^k$, де параметр α обираємо з умови, що вектори x^k та z^{k+1} – спряжені. Маємо: $\alpha = \dfrac{(x^k)^T Q^* x^{k+1}}{(x^k)^T Q^* x^k}$. Вважаємо $x^{k+1} = z^{k+1}$ і процес пошуку власного вектора методом зворотної ітерації продовжується. Шуканий власний вектор буде досягнутий, якщо виконається умова $\| x^{k+1} - x^k \| \le \varepsilon$, де ε – задана точність розрахунків. Збіжність методу спряжених напрямів слідує безпосередньо із збіжності методу простої ітерації.

Зауважимо, що значення $\alpha = \beta \dfrac{(x^k)^T Q^* x^{k+1}}{(x^k)^T Q^* x^k}$, де $\beta \in (0,1]$, зберігає спряженість векторів x^k та z^{k+1}. Таким чином, β – регульований параметр, і швидкість збіжності розглянутого методу іноді залежить від вибору відповідного значення параметра β. Для скорочення обчислень у формулі для параметра α замінимо матрицю Q^* на обернену. Тоді $\alpha = \beta \dfrac{(x^k)^T (Q^*)^{-1} x^{k+1}}{(x^k)^T (Q^*)^{-1} x^k} = \beta \dfrac{\| x^{k+1} \|^2}{(x^k)^T x^{k+1}}$. Це дозволяє збільшити швидкість і точність обчислення власного вектора (рекомендується вибирати $\beta = 0{,}5$).

Були розроблені програми методу QR, методу зворотної ітерації, методу ітерації з відношенням Релея, методу Якобі і даної модифікації, що використовує спряжені напрями. Як показали чисельні експерименти, запропонована модифікація методу оберненої ітерації, що використовує спряжені напрями, дозволяє збільшити швидкість збіжності до власного вектору матриці в середньому в 1,5 рази. Це дозволяє прискорити збіжність методів напіввизначеної оптимізації, зокрема напіввизначеного симплекс-методу.

Описана вище модифікована процедура оберненої ітерації була використана для удосконалення напіввизначеного симплекс-методу.

Розглянемо пряму задачу напіввизначеного програмування (1), де необхідно знайти додатно напіввизначену матрицю X^*. Важливою характеристикою розв’язку задачі (1) є ранг матриці X^*. У роботі доведена наступна теорема.

***Теорема* 2.3.** *Ранг матриці* X^* *задачі* (1) *не перевищує числа* m.

Таким чином, кількість обмежень в задачі (2) впливає на ранг матриці X^*. Якщо $m = 1$, то ранг матриці дорівнює одиниці.

Відомо, що будь-яка додатно напіввизначена матриця може бути розкладена на суму матриць рангу одиниця, які завжди можна представити у вигляді xx^T. Таким чином, матриці рангу одиниця визначаються векторами $x^j = (x_1^j, \ldots, x_n^j)$. Ці матриці являють собою крайні промені (твірні) конуса додатно напіввизначених матриць K, а їх опукла комбінація визначає K. Число таких твірних нескінченне, але існує їх скінченний набір, який утворює конус K^* (конус K^* – це конус, який містить розв’язок задачі (1)).

В напіввизначеному симплекс-методі початковий додатно напіввизначений конус вибирається у вигляді багатогранного конусу, що визначається набором його твірних. Оберемо начальний набір твірних, які визначаються векторами x_j з компонентами рівними –1, 0, 1, причому тільки дві або одна компоненти цих векторів відмінні від нуля. Цей набір векторів є достатнім, але не необхідним, так як доведення збіжності напіввизначеного симплекс-методу не залежить від початкової кількості векторів. Ця кількість тільки впливає на число ітерацій методу. Позначимо ці матриці рангу одиниця через $X_j = x_j x_j^T$, а відповідний багатогранний конус – через K_0. Будемо шукати розв'язок задачі (1) у вигляді $X = \sum_j \alpha_j X_j$, де кількість доданків дорівнює $n(n+1)/2$ та $\alpha \geq 0$. Тоді задача (1) перетвориться до вигляду

$$\min\{\sum_j \alpha_j C \bullet X_j \mid \sum_j \alpha_j A_i \bullet X_j = b_i,\ i = 1,\dots,m,\ \alpha \geq 0\}. \qquad (5)$$

Розв'язок задачі (5) α^* визначить додатно напіввизначену матрицю $X = \sum_j \alpha_j^* X_j$, яка буде розв'язком задачі (1), якщо $X^* \subseteq K_0$ (це положення доводиться у сформульованій далі теоремі 2.4). У протилежному випадку, конус K_0 необхідно збільшити (це положення доводиться у сформульованій далі теоремі 2.5).

***Теорема* 2.4.** *Якщо багатогранний конус, що визначається X_j, містить розв'язок задачі SDP* (1)*, то оптимальне значення α задачі лінійного програмування* (5) *визначить розв'язок задачі SDP.*

***Теорема* 2.5.** *Нехай задача SDP має розв'язок та D_0 – її допустима множина. Тоді додавання в її матрицю обмежень нового стовпця утворює множину D_1, таку що $D_0 \subseteq D_1$.*

Задача (5) є задачею лінійного програмування, яку будемо розв'язувати симплекс-методом. У симплекс-методі на кожній ітерації знаходиться базисний розв'язок та перетворюється рядок цільової функції так, щоб при базисних змінних коефіцієнти цільової функції (оцінки) були рівними нулю. В новий базисний розв'язок включається стовпець матриці обмежень з мінімальним значенням коефіцієнта перетвореної цільової функції. Цей базисний розв'язок зменшує значення цільової функції, якщо оцінка в перетвореному рядку цільової функції від'ємна. Для напіввизначеного симплекс-методу новий стовпець матриці обмежень потрібно побудувати.

***Зауваження* 1.** В задачах лінійного програмування можливі ситуації зациклення. Теорема Бленда дає простий алгоритм виходу з цього зациклення, тому виродженість у симплекс-методі можна розглядати як локальне явище. В напіввизначеному симплекс-методі питання виродженості вирішується при розв'язанні задачі лінійного програмування (5), яка розв'язується звичайним симплекс-методом. Крім того, для розв'язування задачі лінійного програмування (5) можна використовувати прямо-двоїстий метод внутрішньої точки, для якого виродженість не є проблемою (значення цільової функції спадає).

Шуканий новий стовпець матриці обмежень задачі (5) будемо визначати довільною матрицею рангу одиниця $x_k x_k^T$. Для цього стовпця оцінка в перетвореному рядку цільової функції повинна бути мінімальною. Знайдемо цю оцінку. Позначимо через B – матрицю базисних елементів оптимального розв'язку задачі (5). Тоді елементи нового k-го стовпця матриці обмежень задачі (5) будуть дорівнювати

$B^{-1}(A_1 \bullet x_k x_k^T, A_2 \bullet x_k x_k^T, ..., A_m \bullet x_k x_k^T)$, а рядок цільової функції перетворимо за формулою $(C - \sum_i C \bullet x_i x_i^T \sum_{j=1}^{m} b_{ij}^{-1} A_j) \bullet x_k x_k^T$, де сумування проводиться по всім базисним стовпцям матриці обмежень задачі (5), а b_{ij}^{-1} – елементи матриці B^{-1}. Позначимо $Q = C - \sum_i C \bullet x_i x_i^T \sum_{j=1}^{m} b_{ij}^{-1} A_j$, тоді, оскільки $Q \bullet x_k x_k^T = x_k^T Q x_k$, то вираз $x_k^T Q x_k$ буде необхідною оцінкою та необхідно знайти таке x_k, щоб оцінка $x_k^T Q x_k$ була мінімальною. Якщо $x_k^T Q x_k < 0$, то введення k-го стовпця в базис призведе до зменшення цільової функції задачі (5). Якщо ж матриця Q – додатно напіввизначена, то $x^T Q x \geq 0, \forall x$ і значення цільової функції задачі (5) не може бути зменшено, тоді поточний розв’язок є оптимальним для задачі (1) (див. теорему 2.6).

Для знаходження x_k розв’яжемо задачу квадратичної оптимізації

$$\min\{ x^T Q x \,|\, \|x\|^2 = 1 \}. \tag{6}$$

методом оберненої ітерації з використанням спряжених напрямів, описаним вище.

Якщо x^* – розв’язок задачі (6), то матриця Q – додатно напіввизначена при умові $x^{*T} Q x^* \geq 0$. У цьому випадку задача (1) розв’язана, у протилежному випадку пошук нових стовпців матриці обмежень задачі (5) та розв’язування задачі (5) симплекс-методом буде продовжено. Це твердження випливає з теореми 2.6.

Порівняльні чисельні експерименти виконувалися для задач SDP різної розмірності. За критерії визначення ефективності методів бралися точність і час розв’язання, а також точність виконання обмежень. Експерименти показали переваги напіввизначеного симплекс-методу як за швидкістю розв’язування задач, так і за точністю виконання обмежень. Також були проведені експерименти з розробленою програмою, що реалізує напіввизначений симплекс-метод, та існуючими програмними пакетами CSDP, PENSDP, SDPA, SDPT3, SEDUMI з використанням NEOS-сервера. З результатів експериментів можна зробити висновок, що напіввизначений симплекс-метод не поступається методам внутрішньої точки, навіть при тому, що його програмна реалізація не є оптимальною.

Таким чином, розглянутий напіввизначений симплекс-метод має низку переваг перед методами внутрішньої точки. У роботі визначено ці переваги.

1. Розмірність задачі, яка розв'язується напіввизначеним симплекс-методом, дорівнює $q + k$, де $q \geq m$ – початкова кількість матриць рангу одиниця, k – число ітерацій методу. Розмірність задачі, яка розв’язується методом внутрішньої точки, дорівнює $m+(n+1)n$, де m – розмірність вектора змінних y двоїстої задачі, $(n+1)n$ – кількість змінних (компонент) симетричних матриць X та Z. При перетворенні задачі SDP до канонічного виду вводяться вільні змінні, які для методу внутрішньої точки потребують відповідного збільшення усіх матриць обмежень.

2. Ще більша різниця у числі обмежень. Число обмежень задачі при розв’язуванні симплекс-методом дорівнює m. Число обмежень задачі при розв’язуванні методом внутрішньої точки зростає до $m+n(n+1)/2+n^2$. З цього випли-

ває, що у напіввизначеному симплекс-методі на кожній ітерації потрібно розв'язувати лінійну систему рівнянь (m, m), а в методі внутрішньої точки відповідно $(m+n(n+1)/2+n^2, m+n(n+1)/2+n^2)$.

3. Область задач, які можуть бути розв'язані напіввизначеним симплекс-методом, є ширшою, тому що в точках розв'язку не потребується рівність цільових функцій прямої та двоїстої задач. Крім того напіввизначений симплекс-метод не потребує лінійної незалежності матриць обмежень.

4. Напіввизначений симплекс-метод є нечутливим до вибору початкової точки (використовується метод штучного базису), в той час як збіжність методів внутрішньої точки залежить від вибору початкової точки при розв'язуванні задачі.

5. Точність розв'язків, отриманих напіввизначеним симплекс-методом, є значно вищою, так як в методі внутрішньої точки використовується штраф, що є наближеним перетворенням.

6. Метод внутрішньої точки містить два параметри, від значень яких залежить його збіжність, в той же час напіввизначений симплекс-метод не містить будь-яких параметрів.

7. Напіввизначений симплекс-метод досить просто встановлює пустоту та необмеженість допустимої множини.

У роботі сформульовано та доведено три теореми, які показують, що послідовність ітерацій напіввизначеного симплекс-методу збігається до розв'язку задачі SDP.

***Теорема* 2.6.** *Якщо існує розв'язок задачі* (1) *з меншим значенням цільової функції, ніж у точці* $\sum_j \alpha_j^* X_j$ *(*α^* *– розв'язок задачі* (5)), *то тоді існує матриця* X_k *рангу одиниця, така, що для розширеної задачі* (5) *справедлива нерівність* $C \bullet \left(\sum_j \alpha_j X_j + \alpha_k X_k\right) < C \bullet \sum_j \alpha_j^* X_j$.

Теорема 2.6 стверджує, що спадання цільової функції задачі (5) при додаванні нових стовпців в обмеження задачі буде до тих пір, поки опукла оболонка матриць X_j не буде містити розв'язок X^*, але тоді розв'язок задачі (5) однозначно визначить розв'язок задачі (1).

Для доведення збіжності розглянутого симплекс-методу необхідно наступне твердження.

***Теорема* 2.7.** *Гранична точка послідовності* $\{x^k\}$ *належить* ε*-околу точки мінімуму* x^* *неперервної функції* $f(x)$ *на компактній допустимій множині, якщо* $f(x)$ *– обмежена на цій множині і для довільного* $\varepsilon > 0$ *(*ε *– точність обчислень), значення* $f(x)$ *спадає, а поза* ε*-околом точки* x^* *справедлива нерівність* $f(x^{k+1}) < f(x^k) - \delta,\ \delta > \varepsilon, \forall k$.

Безпосередньо з теореми 2.6 та теореми 2.7 випливає збіжність напіввизначеного симплекс-методу.

***Теорема* 2.8.** *Нехай знайдений розв'язок задачі* (5), *який визначає матрицю* X^k *і для якого виконується умова* $C \bullet X^k - C \bullet X^* > \varepsilon > 0$ *та* $B(\varepsilon)$ *–* ε*-окіл розв'язку* X^* *задачі* (1). *Тоді гранична точка* X^∞, *яка визначається послідовністю розв'язків задач* (5), *належить* $B(\varepsilon)$.

Основні результати другого розділу опубліковано у роботах [1, 6–8, 10, 13].

У **третьому розділі** описано використання напіввизначеної оптимізації для розв'язування загальних квадратичних задач, задачі максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів і квадратичних задач з булевими змінними, а також наведено чисельні експерименти з використанням розроблених програм з критичним аналізом результатів. Для цих задач запропоновано та перевірено на практиці нову процедуру розв'язання, яка ґрунтується на використанні нижньої оцінки, отриманої за допомогою напіввизначеної релаксації, для знаходження верхньої оцінки початкової задачі. Обґрунтовано переваги напіввизначеної релаксації та досліджено її точність.

Загальна задача квадратичної оптимізації має наступний вигляд:

$$\min\left\{ x^T Qx + d^T x \mid x^T A_i x + b_i^T x \le c_i,\ i = 1,\ldots,m \right\}, \tag{7}$$

де Q та A_i – симетричні матриці $(n \times n)$; x – вектор-стовпчик змінних розмірності n; b_i та d – вектор-стовпчики розмірності n; c_i $(i = 1,\ldots,m)$ – скаляр.

Використаємо напіввизначену релаксацію для розв'язування квадратичної задачі (7). Отримаємо таку задачу напіввизначеної оптимізації:

$$\min\left\{ \tilde{Q} \bullet Y \mid \tilde{A}_i \bullet Y \le 0,\ i = 1,\ldots,m,\ Y \succeq 0 \right\}, \tag{8}$$

$$\text{де } Y = \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 1 & x^T \\ x & xx^T \end{pmatrix},\ \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 0 & \dfrac{d^T}{2} \\ \dfrac{d}{2} & Q \end{pmatrix},\ \tilde{A}_i = \begin{pmatrix} -c_i & \dfrac{b_i^T}{2} \\ \dfrac{b_i}{2} & A_i \end{pmatrix}. \tag{9}$$

У роботі уперше застосовується напіввизначений симплекс-метод для розв'язування задач (8), які отримуються шляхом застосування напіввизначеної релаксації до загальних квадратичних задач (7). Якщо отримана матриця Y буде мати ранг одиниця, то отриманий розв'язок задачі (8) є глобальним мінімумом задачі (7). Якщо ж ранг матриці Y буде більшим одиниці, то ми отримали нижню оцінку цільової функції задачі (7). Тоді в роботі пропонується використовувати нову процедуру пошуку верхніх та нижніх оцінок: для цього продовжимо розв'язувати початкову задачу (7) методом внутрішньої точки для локальної оптимізації, використовуючи у якості початкової точки отриманий розв'язок задачі (8). Таким чином, отримаємо верхню оцінку цільової функції задачі (7). Чисельні експерименти над відомими тестовими задачами показують, що верхня оцінка приблизно в 91,66 % випадків співпадає з розв'язком задачі (7). Це свідчить про те, що напіввизначена релаксація дозволяє отримувати розв'язки в околі точки глобального мінімума задачі (7). Зауважимо, що така процедура розв'язання загальних квадратичних задач раніше не досліджувалася. У деяких задачах знайдена нижня оцінка була оптимальною.

У роботі пропонується модифікувати обмеження загальної квадратичної задачі та таким чином звести її до задачі максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів, а потім застосовувати напіввизначену релаксацію до отриманої задачі.

У роботі задача (7) за допомогою точної квадратичної регуляризації перетворена на задачу максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів

$\max\left\{\|\tilde{x}\|^2 \mid x^T Qx + p^T x + s + (r-1)(\|\tilde{x}\|^2) - d \le 0,\ x^T A_i x + b_i^T x - c_i + r\|\tilde{x}\|^2 - d \le 0,\right.$ $\left. i = 1,\dots,m\right\}$, де $\tilde{x} = (x, x_{n+1})$, s та r – параметри, d – нова змінна. Легко знайти таке значення $r > 0$, для якого допустима множина цієї задачі буде опуклою. В роботі запропоновано застосувати до неї напіввизначену релаксацію. Отримали задачу напіввизначеної оптимізації $\min\left\{\tilde{C}\cdot Y \mid \tilde{A}_i \cdot Y \le 0, i = 1,\dots,m+1, Y \succeq 0\right\}$, яку розв'язуємо напіввизначеним симплекс-методом та отримуємо нижню оцінку цільової функції задачі (7).

У роботі виконано порівняння нижніх оцінок, отриманих за допомогою напіввизначеної релаксації початкової задачі, з нижніми оцінками, отриманими методом квадратичної регуляризації, та виявлено, що квадратична регуляризація дозволяє отримати кращу нижню оцінку, ніж метод напіввизначеної релаксації. Це обумовлено тим, що допустима множина перетвореної задачі є опуклою.

У роботі сформульовані і доведені теореми, в яких розглядаються деякі типи задач, для яких напіввизначена релаксація є точною. Напіввизначену релаксацію будемо називати точною, якщо розв'язок відповідної задачі SDP однозначно визначає розв'язок початкової квадратичної задачі.

***Теорема* 3.1.** *Напіввизначена релаксація для квадратичної задачі* $\max\{\|x\|^2 \mid x \in P\}$ *є точною, де P – прямокутний паралелепіпед, який можна представити у вигляді* $P = \{ x \mid (x_i - a_i)(x_i - b_i) \le 0,\ i = 1,\dots,n\}$.

При розв'язанні загальних квадратичних задач з додатними змінними для цих змінних визначався паралелепіпед. Це дозволяє покращити точність напіввизначеної релаксації.

***Теорема* 3.2.** *Напіввизначена релаксація для квадратичної задачі* $\max\{\|x\|^2 \mid x \in \Delta\}$ *є точною, де* Δ *– опукла множина – симплекс, який задано наступним чином:* $\Delta = \{ x \mid x_i(x_i - a) \le 0,\ i = 1,\dots,n,\ c^T x = 1\}$.

***Зауваження* 2**. На відміну від паралелепіпеда, відповідна задача SDP матиме ранг 2. Це означає, що вимога рівності ранга матриці задачі SDP одиниці, при якому напіввизначена релаксація буде точною, є тільки достатньою, але не необхідною умовою.

Розглянемо задачу

$$\max\{\|x\|^2 \mid Ax = b, x \ge 0\}. \tag{10}$$

Як і раніше, представимо її у вигляді

$$\max\{\|x\|^2 \mid Ax = b, x_i(x_i - c_i) \le 0, i = 1,\dots,n\}, \tag{11}$$

де значення $c_1, \dots, c_n$ обираємо таким чином, щоб розв'язок задачі (10) був допустимий для задачі (11). Тоді справедливе наступне твердження.

***Теорема* 3.3.** *Нехай* x^* *– розв'язок задачі* (11) *та нерівність* $c^T x^* \ge c^T x$ *виконується для усіх допустимих x, тоді напіввизначена релаксація для задачі* (11) *буде точною.*

У роботі пропонується розв'язувати загальну задачу квадратичної оптимізації з квадратичними обмеженнями та булевими змінними за допомогою напіввизначеної релаксації. Маємо задачу

$$\min\{\ x^T Q_0 x + q_0^T x \mid x^T Q_i x + q_i^T x \le r_i,\ \ i = 1, \ldots, m,\ \ x_i = 0 \vee 1,\ \ x \in R^n\}, \qquad (12)$$

де усі Q_i – симетричні матриці розміру $(n \times n)$; q_i, x – n-вимірні вектора; r_i – скаляр $(i = 1, \ldots, m)$.

Замінимо в задачах (12) булеві змінні квадратичною умовою $x_i(x_i - 1) = 0,\ i = 1, \ldots, n$, де тепер змінні x_i можуть приймати довільні значення. Звичайно, що допустимими будуть тільки значення 0 або 1.

Таким чином, задача (12) перетворюється до загальної квадратичної задачі

$$\min\left\{ x^T Q_0 x + q_0^T x \left| \begin{array}{l} x^T Q_i x + q_i^T x \le r_i, i = 1, \ldots, m, \\ x^T Q_i x + q_i^T x = r_i, i = m+1, \ldots, m+n, x \in E^n \end{array} \right. \right\}. \qquad (13)$$

Використаємо для її розв'язування напіввизначену релаксацію та отримаємо нижню оцінку (12). Для знаходження верхньої оцінки знайдений розв'язок задачі (13) використовуємо в якості початкової точки для розв'язування задачі (12) прямо-двоїстим методом внутрішньої точки. Цей підхід використаний для розв'язання тестових задач про рюкзак: $\max\{p^T x \mid a^T x \le b, x_i = 0 \vee 1\}$, які належать до класу NP-складних. Верхня оцінка розв'язку x^0 цієї задачі, отримана напіввизначеним симплекс-методом, уточнювалася за допомогою розв'язування задачі

$$\min\{\| x - x^0 \|^2 \mid a^T x = b, x_i(x_i - 1) = 0, i = 1, \ldots, n\}$$

прямо-двоїстим методом внутрішньої точки. Результати чисельних експериментів показують, що розв'язок, отриманий методом внутрішньої точки, співпадає з точним розв'язком початкової задачі лінійної оптимізації з булевими змінними.

У роботі обґрунтовано теоретичні переваги напіввизначеної релаксації. По-перше, напіввизначена релаксація дозволяє знайти нижню оцінку або глобальний мінімум в загальних задачах квадратичної оптимізації незалежно від опуклості/неопуклості цільової функції та обмежень. По-друге, перевірка оптимальності знайденого розв'язку на відміну від інших методів не потребує експоненційного часу та є досить простою. По-третє, напіввизначена релаксація дозволяє отримувати розв'язки в околі точки глобального мінімума початкової задачі.

Основні результати третього розділу опубліковано у роботах [2, 4, 5, 14–17].

У **четвертому розділі** описано та удосконалено використання напіввизначеної релаксації для широкого кола прикладних задач напіввизначеного програмування: задачі кластеризації даних, задачі розміщення сенсорних датчиків у мережі та задачі пошуку максимального розрізу графа, наведено чисельні експерименти для цих класів задач. Уперше прикладні задачі зведені до задачі максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів.

У роботі пропонується напіввизначена оптимізація для розв'язування задачі *k*-klustering. Розглянемо множину m точок $\{a^1, \ldots, a^m\}$ в n-вимірному евклідовому просторі. Необхідно розбити цю множину на 2 кластери таким чином, щоб кожна точка потрапила тільки в один кластер. Розглянемо неорієнтований граф G. Точки $\{a^1, \ldots, a^m\}$ є вершинами цього графа. Нехай $w_{ij} = w_{ji}$ – вага дуги (a_i, a_j). Для заданого цілого $k \in 1,\ldots,m-1$ задача *k*-klustering полягає у знаходженні підмножини S, яка включає k вершин, таких, що сумарна вага дуг підграфу, породженого S, є максимальною. Нехай W – матриця ваг дуг графа G. Тоді задачу *k*-klustering можна записати у вигляді задачі булевої оптимізації

$$\max\left\{ \frac{1}{2}x^T Wx \mid \sum_{i=1}^{m} x_i = k,\ x_i = 0 \vee 1,\ i = 1,\ldots,m \right\}, \tag{15}$$

де x_i – флаг, який дорівнює 1, якщо вершина a_i належить підмножині S, і який дорівнює нулю у протилежному випадку; x – вектор стовпчик розмірності m, де $x_1,\ldots,x_m$ – його компоненти.

У роботі за допомогою напіввизначеної релаксації задача (15) була зведена до задачі напіввизначеної оптимізації. Умова $x_i = 0 \vee 1$ була замінена на квадратичну умову $x_i(x_i-1)=0$. Як показали чисельні експерименти, у задачі напіввизначеної оптимізації цю умову задовольняє будь-який розв'язок $X = xx^T$. Тому в роботі пропонується ввести нову змінну z – вектор-стовпчик розмірності m, де $z_1,\ldots,z_m$ – компоненти вектора z, $z_i = x_i + 1$, $x_i = z_i - 1$, та замінити умову булевих змінних умовою $(z_i-1)(z_i-2)=0$, а матрицю розв'язку будемо шукати у вигляді $X = (z-1)(z-1)^T$, де $(z-1)^T = (z_1-1, z_2-1,\ldots,z_m-1)$.

Тоді перепишемо (15) у вигляді

$$\min\left\{ -(z-1)^T W(z-1) \;\middle|\; \begin{array}{l} (z_i-1)(z_i-2)=0,\ i=1,\ldots,m \\ \sum_{i=1}^{m} z_i = k+m \end{array} \right\}. \tag{16}$$

До квадратичної задачі (16) застосувана напіввизначена релаксація. Отримали задачу $\min\left\{ -\mathrm{W} \bullet Z \mid A_i \bullet Z = 0,\ i=1,\ldots,m+1,\ Z \succeq 0 \right\}$, яку розв'язували напіввизначеним симплекс-методом і отримали нижню оцінку цільової функції задачі (15). Очевидно, що знайдені z_i будуть належати проміжку [1; 2]. Для уточнення нижньої оцінки задача (16) була перетворена на задачу максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів. Для знаходження верхньої оцінки цільової функції задачі (16) використовувалася процедура пошуку верхніх і нижніх оцінок. Виконані чисельні експерименти для цього класу задач підтверджують ефективність обраного методу.

У роботі розрахована напіввизначена релаксація розширеної постановки задачі локалізації датчиків у мережі з урахуванням відхилень. Нехай маємо граф $G = (V,E)$ та набір невід'ємних ваг $\left\{ d_{ij} : (i,j) \in E \right\}$. В задачі локалізації датчиків у мережі вершини розділені на дві підмножини: перша підмножина – m закріплених вершин $a^1,\ldots,a^m \in R^n$, чия точна позиція відома, друга підмножина – k вершин $x^1,\ldots,x^k \in R^n$ – множина датчиків, чиє розташування невідомо. Метою є визначити позицію усіх нових датчиків. Нам відомі p значень відстаней d_{ij} між a^i та x^j для деяких i, j, та l значень $\bar{d}_{ij}$ між x^i та x^j для деяких $i < j$. Задача локалізації датчиків у мережі полягає у пошуку таких $x^1,\ldots,\ x^k \in R^n$, які задовольняють умовам

$$\left\|a^i - x^j\right\|^2 = d_{ij}^2,\ \left\|x^i - x^j\right\|^2 = \bar{d}_{ij}^2. \qquad (17)$$

Розв'язати цю нелінійну квадратичну систему рівнянь (17) достатньо складно, тому замінимо її оптимізаційною задачею

$$\min\left\{ \|x\|^2 \ \middle|\ \begin{array}{ll} \left\|a^i - x^j\right\|^2 = d_{ij}^2, & i=1,\ldots,m,\ j=1,..,k \\ \left\|x^i - x^j\right\|^2 = \bar{d}_{ij}^2, & i<j,\ i=1,\ldots,k,\ j=2,\ldots,k \end{array} \right\}. \qquad (18)$$

Задача (18) може не завжди мати розв'язок, тому в дисертаційній роботі розв'язується наступна задача

$$\min\left\{ \|u\|^2 + \|v\|^2 \ \middle|\ \begin{array}{ll} \left\|a^i - x^j\right\|^2 = d_{ij}^2 + u_{ij}, & \forall(i,j),\ i=1,\ldots,m,\ j=1,..,k \\ \left\|x^i - x^j\right\|^2 = \bar{d}_{ij}^2 + v_{ij}, & i<j,\ i=1,\ldots,k,\ j=2,\ldots,k \end{array} \right\}, \qquad (19)$$

де u_{ij} – відхилення від заданої відстані між i-тою вершиною та j-тим датчиком ($i=1,\ldots,m,\ j=1,..,k$); v_{ij} – відхилення від заданої відстані між i-тим та j-тим датчиками ($i<j,\ i=1,\ldots,k,\ j=2,\ldots,k$). Усі значення u_{ij}, де $i=1,\ldots,m,\ j=1,..,k$, формують вектор u розмірності p, де p – кількість відомих відстаней d_{ij}. Усі значення v_{ij}, де $i<j,\ i=1,\ldots,k,\ j=2,\ldots,k$, формують вектор v розмірності l, де l – кількість відстаней $\bar{d}_{ij}$. Очевидно, що задача (19) завжди має розв'язок.

Квадратична задача (19) була перетворена на задачу напіввизначеної оптимізації та використано напіввизначену релаксацію для її розв'язання. Отримали наступну задачу напіввизначеної оптимізації

$$\min\left\{ C \bullet X \ \middle|\ \begin{array}{l} A_{ij} \bullet X = 0,\ \forall(i,j),\ i=1,\ldots,m,\ j=1,\ldots,k,\ X \succeq 0 \\ \bar{A}_{ij} \bullet X = 0,\ \ i<j,\ i=1,\ldots,k,\ j=2,\ldots,k,\ X \succeq 0 \end{array} \right\}. \qquad (20)$$

Для розв'язування задачі (20) застосовано нову, описану вище, процедуру знаходження верхніх та нижніх оцінок. Виконані чисельні експерименти для цього класу задач підтверджують ефективність обраного методу.

У роботі розглянуто напіввизначену релаксацію для задачі пошуку максимального розрізу графа (max-cut). Розглянемо неорієнтований граф G з вершинами $N=\{1,\ldots,n\}$ та множиною дуг E. Нехай $w_{ij}=w_{ji}$ – вага дуги $(i,j)\in E$. Задачею max-cut називається задача визначення підмножини S вершин N, для якої сума ваг дуг, що йдуть з S в $\bar{S}$, максимальна ($\bar{S} = N \setminus S$). Ця задача належить до класу NP-складних. Нехай $x_j=1$ для $j\in S$ та $x_j=-1$ для $j\in\bar{S}$. Тоді задача max-cut формулюється як задача цілочисельної оптимізації: $\max\left\{ \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}(1 - x_i x_j) \,\middle|\, x_j \in \{-1, 1\},\right.$ $\left. j = 1, \ldots, n \right\}$. Для уточнення нижньої оцінки ця задача була перетворена на задачу максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів.

Введемо позначення: $Y = xx^T$, W – матриця, (i, j)-й елемент якої дорівнює w_{ij}, та отримаємо задачу $\min\left\{ W \bullet Y \mid Y \succeq 0, \ \mathrm{diag}(Y) = 1 \right\}$, яка розв'язувалась за допомогою напіввизначеного симплекс-методу. Виконані чисельні експерименти для цього класу задач підтверджують ефективність обраного методу.

У роботі наведені схеми алгоритмів програм для розв'язування задач SDP напіввизначеним симплекс-методом і методом внутрішньої точки.

Основні результати четвертого розділу опубліковано у роботах [3, 9, 11, 12, 18].

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв'язуються задачі напіввизначеної оптимізації та загальні квадратичні задачі, які мають значне застосування в математичному моделюванні складних систем. Основні наукові результати дисертації такі:

– удосконалено та обґрунтувано напіввизначений симплекс-метод як альтернативу існуючим прямо-двоїстим методам внутрішньої точки для розв'язування задач напіввизначеної оптимізації, що дало можливість розширити межі ефективного використання математичного моделювання складних систем;

– уперше використано метод спряжених напрямів у процедурі оберненої ітерації для визначення додатної напіввизначеності матриць (шляхом знаходження власного вектора, відповідного мінімальному власному значенню), що за результатами чисельних експериментів дозволило підвищити точність розрахунків та прискорити збіжність до власного вектора матриці;

– для розв'язування задач напіввизначеної оптимізації удосконалено напіввизначений симплекс-метод та прискорено його збіжність шляхом використання процедури оберненої ітерації та методу спряжених напрямів;

– уперше строго доведено збіжність напіввизначеного симплекс-методу за допомогою теорем і лем;

– визначено теоретичні переваги напіввизначеного симплекс-методу над прямо-двоїстими методами внутрішньої точки, наведено задачі, для яких напіввизначений симплекс-метод знаходить розв'язки, а метод внутрішньої точки не знаходить;

– проведено порівняння результатів програми, яка реалізує напіввизначений симплекс-метод, з відомими програмними пакетами, які реалізують методи внутрішніх точок. Ці експерименти показали, що дана програмна реалізація напіввизначеного симплекс-методу не поступається популярним програмним пакетам методів внутрішньої точки навіть при тому, що його програмна реалізація не є оптимальною;

– уперше використано точну квадратичну регуляризацію для перетворення загальних квадратичних задач до задач максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів, що дало змогу знаходити кращу нижню оцінку цільової функції початкової задачі. Для уточнення нижньої оцінки цільової функції в задачах кластеризації даних і задачах локалізації датчиків у мережі, ці задачі вперше були перетворені на задачу максимізації норми вектора на перетині еліпсоїдів;

– удосконалено напіввизначену релаксацію для квадратичних задач з булевими змінними та прикладних задач, математичні моделі яких описуються з використанням загальних квадратичних функцій (задачі кластеризації даних, задачі розміщення датчиків у мережі, задачі пошуку максимального розрізу графа) шляхом модифікації обмежень задачі. Це дозволило знайти кращі нижні оцінки цільової функції задачі. Розглянута техніка використання напіввизначеної релаксації для даних задач може бути використана також для широкого кола інших прикладних задач, математичні моделі яких можуть бути представлені загальними квадратичними функціями;

– введено нове поняття точності напіввизначеної релаксації та для окремих класів задач максимізації норми вектора на опуклій множині доведена точність напіввизначеної релаксації;

– розраховано напіввизначену релаксацію розширеної постановки задачі локалізації датчиків у мережі з урахуванням відхилень, що дало змогу знаходити розв'язки задач, які у стандартній постановці розв'язку не мають;

– уперше запропоновано та перевірено на практиці нову процедуру для знаходження верхніх і нижніх оцінок цільової функції у загальних задачах квадратичної оптимізації. Як показали чисельні експерименти, в 91,66 % випадків отримана верхня оцінка співпадала з глобальним мінімумом початкової задачі.

Виконані дослідження дозволяють зробити висновок, що подальше вдосконалення напіввизначеної релаксації пов'язано з використанням точної квадратичної регуляризації в напіввизначений оптимізації, яка дозволяє при визначених умовах отримувати значення глобального мінімуму загальних квадратичних задач з більшою точністю. Крім цього, подальші дослідження будуть спрямовані на розширення класів задач, для яких напіввизначена релаксація буде точною.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Косолап А. И. Численная эффективность методов полуопределенной оптимизации / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Проблемы управления и информатики. – 2014. – № 2. – С. 56–64.

2. Косолап А. І. Напіввизначена оптимізація для моделювання складних систем / А. І. Косолап, А. С. Перетятько // Математичні машини і системи. – 2012. – № 1. – С. 174–179.

3. Косолап А. И. Полуопределенная оптимизация в задаче расположения датчиков в сети / Косолап А. И., Перетятько А. С. // Математичні машини і системи. – 2014. – № 2. – С. 105–112.

4. Косолап А. И. Верхние и нижние оценки решений в общих задачах квадратичной оптимизации / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». – 2013. – Вип. 23, № 1089. – С. 96–102.

5. Косолап А. И. Полуопределенное программирование для решения задач комбинаторной оптимизации / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Вісник Запорізького національного університету. Серія «Прикладная математика. Інформатика». – 2013. – № 2. – С. 50–55.

6. Косолап А. И. Полуопределенный симплекс-метод / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Вісник Черкаського університету. Серія «Прикладная математика. Інформатика». – 2013. – № 18 (271). – С. 50–56.

7. Косолап А. И. Сопряженные направления в задачах на собственные значения симметричных матриц / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Проблеми обчислювальної механіки і міцності конструкцій: зб. наук. праць. – Дніпропетровськ: Ліра, 2013. – Вип. 21. – С. 114–122.

8. Peretiatko A. S. Using semidefinite simplex method for solving semidefinite problems / A. S. Peretiatko // Theoretical & Applied Science. – 2013. – № 12 (8). – P. 5–8.

9. Косолап А. И. Поиск максимально плотной упаковки сфер в пространстве / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Хімія та сучасні технології: тези доповідей VI Міжнар. наук.-техн. конф. студентів, аспірантів та молодих вчених, 24-26 квітня 2013 р., м. Дніпропетровськ. – Дніпропетровськ: Український державний хіміко-технологічний університет, 2013. – т. 3. – С. 121–122.

10. Косолап А. І. Збігання узагальненого симплекс-методу для напіввизначеної оптимізації / А. І. Косолап, А. С. Перетятько // Інформатика та системні науки: матеріали III Всеукр. наук.-практ. конф., 1-3 березня 2012 р., м. Полтава. – Полтава: ПУЕТ, 2012. – С. 153–156.

11. Перетятько А. С. Використання напіввизначеної оптимізації для розв’язку задачі пошуку максимального розрізу графа / А. С. Перетятько, А. І. Косолап // Dynamical system modelling and stability investigation: abstracts of conference reports of XV International Conference, May 25-27 2011, Kyiv. – К.: Taras Shevchenko National University of Kyiv, 2011. – С. 376.

12. Перетятько А. С. Использование полуопределенной релаксации для решения задачи кластеризации данных / А. С. Перетятько // Актуальные проблемы современной науки: сборник статей Междунар. науч.-практ. конф., 13-14 декабря 2013 г. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2013. – т. 2. – С. 307–310.

13. Перетятько А. С. Обобщенный симплекс-метод для решения задач полуопределенной оптимизации / А. С. Перетятько, А. И. Косолап // Обчислювальна та прикладна математика: матеріали IV Міжнар. конф. ім. академіка І. І. Ляшка, 8-10 вересня 2011 р., м. Київ. – К.: Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, 2011. – С. 110.

14. Перетятько А. С. Напіввизначена оптимізація для розв’язку загальних квадратичних задач / А. С. Перетятько // Інформатика та системні науки: матеріали V Всеукр. наук.-практ. конф. за міжнар. участю, 13-15 березня 2014 р., м. Полтава. – Полтава: ПУЕТ, 2014. – С. 240–243.

15. Перетятько А. С. Эффективность полуопределенной релаксации для решения общих квадратичных задач / А. С. Перетятько // Обчислювальна та прикладна математика: матеріали VII Міжнар. наук. конф. ім. академіка І. І. Ляшка, 9-10 жовтня 2014 р., м. Київ. – К.: Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, 2014. – С. 82.

16. Косолап А. І. Точність напіввизначеної релаксації для задач максимізації норми вектора [Електронний ресурс] / А. І. Косолап, А. С. Перетятько // Інформатика та системні науки: матеріали VI Всеукр. наук.-практ. конф. за міжнар. участю, 19-21 березня 2015 р., м. Полтава. – Електорон. дані (1 файл). – Полтава: ПУЕТ, 2015. – [3 с.]. – Режим доступу: http://dspace.puet.edu.ua/handle/123456789/ 2489.

17. Kosolap A. The upper and lower bounds for solutions of general quadratic optimization problems / Anatolii Kosolap, Anastasiia Peretiatko // Computer science & engineering: матеріали VI Міжнар. наук. конф. молодих вчених, 21-23 листопада 2013 р., м. Львів. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2013. – С. 94–95.

18. Косолап А. И. Применение задачи полуопределенной оптимизации в задаче локализации датчиков в сети / А. И. Косолап, А. С. Перетятько // Математичне та імітаційне моделювання систем: тези доповідей VII Міжнар. наук.-практ. конф., 25-28 червня 2012 р., м. Чернігів-Жукин. – Чернігів: Чернігівський державний технологічний університет, 2012. – С. 300–303.

АНОТАЦІЯ

Перетятько А.С. Напіввизначена оптимізація для розв’язування загальних квадратичних задач. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Харківський національний університет радіоелектроніки Міністерства освіти і науки України, Харків, 2015.

У дисертаційній роботі удосконалюються теорія та чисельні методи напіввизначеної оптимізації, розширюється її використання для розв’язування загальних квадратичних задач, які виникають при математичному моделюванні складних систем. Як альтернативу прямо-двоїстим методам внутрішньої точки для розв’язування задач напіввизначеної оптимізації удосконалено та обґрунтовано напіввизначений симплекс-метод, визначені його теоретичні та чисельні переваги. Для методів напіввизначеної оптимізації розроблена ефективна процедура визначення додатної напіввизначеності матриці з використанням методу спряжених напрямів.

У роботі розглянута напіввизначена релаксація, яка дозволяє перетворювати загальні квадратичні задачі до задач напіввизначеної оптимізації. Знайдені перетворення початкової квадратичної задачі, які уточнюють напіввизначену релаксацію. Зокрема, для таких перетворень використана точна квадратична регуляризація, яка дозволяє отримувати точну напіввизначену релаксацію для визначених класів задач квадратичної оптимізації. Запропоновано та перевірено на практиці нову процедуру знаходження верхніх і нижніх оцінок цільової функції у загальних задачах квадратичної оптимізації.

Виконані значні порівняльні експерименти свідчать про перевагу розроблених методів при розв’язуванні складних багатоекстремальних квадратичних задач.

Ключові слова: напіввизначена оптимізація, загальна квадратична задача, напіввизначений симплекс-метод, напіввизначена релаксація.

АННОТАЦИЯ

Перетятько А.С. Полуопределенная оптимизация для решения общих квадратичных задач. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы. – Харьковский национальный университет радиоэлектроники Министерства образования и науки Украины, Харьков, 2015.

В диссертационной работе усовершенствованы теория и численные методы полуопределенной оптимизации, а также расширяется ее использование для решения общих квадратичных задач, которые возникают при математическом моделировании сложных систем. В качестве альтернативы прямо-двойственным методам внутренней точки для решения задач полуопределенной оптимизации усовершенствован полуопределенный симплекс-метод, исследована и строго доказана его сходимость, определены его теоретические и численные преимущества. Для методов полуопределенной оптимизации разработана эффективная процедура определения положительной полуопределенности матрицы (путем нахождения собственного вектора, соответствующего минимальному собственному значению) с использованием метода сопряженных направлений в процедуре обратной итерации. Эта процедура используется на каждой итерации полуопределенного симплекс-метода для ускорения его сходимости.

В работе рассмотрена полуопределенная релаксация, которая позволяет преобразовывать общие квадратичные задачи к задачам полуопределенной оптимизации. Рассмотренная техника использования полуопределенной релаксации для данных задач использована также для широкого круга прикладных задач, математические модели которых могут быть представлены общими квадратичными функциями: задачи кластеризации данных, задачи размещения датчиков в сети, задачи поиска максимального разреза графа, а также прикладных задач, которые описываются квадратичными моделями с булевыми переменными.

Для решения общих квадратичных задач и прикладных задач (задачи кластеризации данных, задачи размещения датчиков в сети, задачи max-cut, булевых задач) впервые использована точная квадратичная регуляризация и другие преобразования начальной квадратичной задачи, которые уточняют полуопределенную релаксацию. Проведено сравнение нижних оценок, полученных с помощью полуопределенной релаксации исходной задачи, с нижними оценками, полученными методом максимизации нормы вектора на пересечении эллипсоидов (квадратичной регуляризацией) и установлено, что использование метода максимизации нормы вектора на пересечении эллипсоидов позволяет найти лучшую нижнюю оценку, чем метод полуопределенной релаксации.

Определены преимущества использования полуопределенной релаксации для решения общих квадратичных задач и задач, которые сводятся к ним, путем проведения значительных численных экспериментов с использованием разработанных программ на известных тестовых задачах.

В работе введено понятие точности полуопределенной релаксации и для отдельных классов задач максимизации нормы вектора на пересечении эллипсоидов

доказана точность полуопределенной релаксации.

Впервые предложена и проверена на практике новая процедура нахождения верхних и нижних оценок целевой функции, которая в 91,66 % случаев позволила получить оптимальные решения в общих задачах квадратичной оптимизации.

Выполнено значительное количество сравнительных экспериментов, которые свидетельствуют о преимуществе разработанных методов при решении сложных многоэкстремальных квадратичных задач.

Проведенные исследования позволяют сделать вывод, что дальнейшее совершенствование полуопределенной релаксации связано с использованием метода точной квадратичной регуляризации в полуопределенной оптимизации, который позволяет при определенных условиях получать значение глобального минимума общих квадратичных задач с большей точностью. Кроме этого, дальнейшие исследования будут направлены на расширение классов задач, для которых полуопределенная релаксация будет точной.

Ключевые слова: полуопределенная оптимизация, общая квадратичная задача, полуопределенный симплекс-метод, полуопределенная релаксация.

ABSTRACT

Peretiatko A.S. Semidefinite optimization for solving general quadratic problems. – The manuscript.

Thesis for a candidate of physical and mathematical sciences degree in the speciality 01.05.02 – mathematical modeling and computational methods. – Kharkiv National University of Radio Electronics, Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2015.

The thesis is devoted to theory and numerical methods for semidefinite optimization and to its use for solving general quadratic problems arising in mathematical modeling of complex systems.

As alternative to primal-dual interior point methods semidefinite simplex-method was improved and proved, its theoretical and numerical advantages were defined. For semidefinite optimization methods an effective procedure for determination of positive semidefiniteness of matrices using the method of conjugate directions was developed.

Much attention is given to semidefinite relaxation which allows to transform general quadratic problems to semidefinite optimization problems. The transformations of initial quadratic problem, that refine the semidefinite relaxation, were found. In particular, for such transformations the exact quadratic regularization was used, which enables to get exact semidefinite relaxation for certain classes of quadratic optimization problems. The new procedure of finding the upper and lower bounds of the objective function in the general quadratic optimization problems was proposed and tested.

Significant comparative experiments show the superiority of the developed methods for solving complex quadratic multi-extremal problems.

Keywords: semidefinite optimization, general quadratic problem, semidefinite simplex-method, semidefinite relaxation.