УДК 519.85

О. С. Пичугина*, канд. физ.-мат. наук, докторант,
С. В. Яковлев,** д-р физ.-мат. наук, профессор

*Харьковский национальный университет радиоэлектроники, г. Харьков,
**Национальный аэрокосмический университет, г. Харьков

МЕТОДЫ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НА ПЕРЕСТАНОВОЧНОМ МНОГОГРАННИКЕ В КОМБИНАТОРНЫХ ЗАДАЧАХ НА ВЕРШИННО РАСПОЛОЖЕННЫХ МНОЖЕСТВАХ

Рассмотрена общая постановка задачи оптимизации произвольной функции на дискретном вершинно расположенном множестве E с учетом дополнительных функциональных ограничений. С использованием теории выпуклых продолжений сформулирована эквивалентная на E задача оптимизации выпуклой функции при выпуклых ограничениях-неравенствах. Предложен гибридный подход к оптимизации на перестановочном многограннике на основе совместного использования метода штрафных функций и модификации метода условного градиента. При выполнении достаточно общих условий обоснована сходимость предложенного метода к глобальному решению.

Ключевые слова: *вершинно расположенное множество, выпуклое продолжение, перестановочный многогранник, метод штрафных функций, метод условного градиента.*

Введение. В последнее время учитывая расширение средств математического и компьютерного моделирования, создание новых высокопроизводительных программных продуктов резко возрос интерес к труднорешаемым комбинаторным задачам [1–4]. К указанному классу относятся так называемые задачи евклидовой комбинаторной оптимизации [5–7], получившие такое название учитывая то, что исследуемые комбинаторные объекты рассматриваются в результате их отображения в арифметическое евклидово пространство. При этом задачи приобретают свою специфику, что позволяет предлагать новые эффективные методы.

В данной работе рассмотрен класс задач евклидовой комбинаторной оптимизации на так называемых вершинно расположенных множествах. Речь идет о множествах, которые после отображения в R^n совпадают со множеством вершин своей выпуклой оболочки. Заметим, что, одной стороны, произвольное дискретное множество можно представить в виде объединения его вершинно расположенных подмножеств. С другой стороны, задачи оптимизации на вершинно расположенных множествах обладают рядом интересных свойств, позволяющих по-новому взглянуть на возможности современной теории математического про-

 © О. С. Пичугина, С. В. Яковлев, 2017

граммирования для их решения. В частности, речь идет о применении теории выпуклых продолжений [8] к оптимизации на вершинно расположенных множествах. Заметим, что к классу вершинно расположенных относятся множества перестановок с повторениями и без повторений при их отображении в R^n .

Цель данной статьи — разработка методов оптимизации на перестановочном многограннике с учетом специфики евклидового множества перестановок и свойств функций, заданных на них.

Постановка задачи и методы ее решения. Пусть $E \subset R^n$ — конечное множество точек арифметического евклидового пространства.

Рассмотрим следующую задачу дискретной оптимизации:

$$f(x) \to \min , \tag{1}$$

$$g_i(x) \le 0,\ i \in J_{l'} , \tag{2}$$

$$g_i(x) = 0,\ i \in J_l \setminus J_{l'} , \tag{3}$$

$$x \in E , \tag{4}$$

где функции $f(x)$, $g_i(x)$, $i \in J_l$ определены на E . Здесь и далее обозначим $J_l = \{1,...,l\}$.

Выделим класс множеств $E \subset R^n$, удовлетворяющих условию

$$E = vert\ conv\ E , \tag{5}$$

т. е. совпадающих со множеством вершин своей выпуклой оболочки.

Такие множества будем называть вершинно расположенными.

Функции, определенные на вершинно расположенных множествах, обладают следующим важным свойством.

Теорема 1 [8]. Для любой функции $f : E \to R^1$ существует дифференцируемая сильно выпуклая функция $\tilde{f} :\ conv\ E \to R^1$, такая, что

$$\tilde{f}(x) = f(x) \text{ для любых } x \in E . \tag{6}$$

Для функций, удовлетворяющих на множестве E условию (6), будем использовать обозначение

$$\tilde{f}(x) \underset{E}{=} f(x) . \tag{7}$$

Функцию $\tilde{f}(x)$, заданную на множестве $X \supseteq conv\ E$ и удовлетворяющую условию (7), назовем продолжением функции $f(x)$ на X.

Если при этом функция $\tilde{f}(x)$ выпукла (сильно выпукла, дифференцируема) на выпуклом множестве X, то будем говорить о выпуклом (сильно выпуклом, дифференцируемом) продолжении $f(x)$ на X.

Осуществим следующие эквивалентные преобразования задачи (1)–(5). Представим ограничения-равенства (3) в виде:

$$\begin{gathered} g_i(x) \le 0, \\ -g_i(x) \le 0,\ i \in J_l \setminus J_{l'}. \end{gathered} \tag{8}$$

Построим дифференцируемые выпуклые продолжения на $convE$ для функции $f(x)$ и функций, стоящих в левых частях ограничений (2), (8):

$$F(x) \underset{E}{=} f(x),$$

$$h_i(x) \underset{E}{=} g_i(x),\ i \in J_l,$$

$$h_i(x) \underset{E}{=} -g_{i-l}(x),\ i \in J_m \setminus J_l,$$

где $m = 2l - l'$. Тогда с учетом теоремы 1 имеет место следующее утверждение.

Теорема 2. Задача (1)–(5) эквивалентна задаче:

$$F(x) \to \min, \tag{9}$$

$$h_i(x) \le 0,\ i \in J_m, \tag{10}$$

$$x \in E = vert\ conv\ E,$$

где $F(x),\ h_i(x),\ i \in J_m$ — выпуклы и дифференцируемы на $conv\ E$.

Рассмотрим в качестве множества E следующее евклидовое комбинаторное множество. Пусть

$$A = \{a_1, ..., a_n\} \text{ —} \tag{11}$$

множество n действительных чисел, среди которых s различные.

Не теряя общности, будем полагать, что

$$a_i \le a_{i+1},\ i \in J_{n-1}. \tag{12}$$

Множество (11) порождает множество E_{ns}, элементами которого являются упорядоченные наборы $x = (x_1, ..., x_n)$, где $x_i = a_{\pi_i}$, $i \in J_n$, а $\pi = (\pi_1, ..., \pi_n)$ — перестановка первых n натуральных чисел. Если все элементы множества A различны, то такое множество называется евклидовым множеством перестановок. Если же множество A содержит одинаковые элементы, то имеем евклидово множество перестановок с повторениями.

Евклидовые множества перестановок и перестановок с повторениями достаточно хорошо изучены [5–7]. Отметим тот важный факт, что они являются вершинно расположенными. Следовательно, на эти множества распространяются утверждения теорем 1, 2. При этом для построения дифференцируемых выпуклых и сильно выпуклых продолжений функций, фигурирующих в указанных теоремах, предложен ряд конструктивных приемов [7–10].

Выпуклой оболочкой множества E_{ns} является так называемый перестановочный многогранник Π_{ns} [5–7, 11]. Известно, что он описывается следующей системой линейных уравнений и неравенств:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} a_i \; ; \; \sum_{i \in \omega} x_i \geq \sum_{i=1}^{|\omega|} a_i \; , \; \forall \omega \subseteq J_n \, , \; |\omega| < n \, , \tag{13}$$

где $|\omega|$ — мощность множества ω.

Рассмотрим оптимизационную задачу вида (9), (10), (13), где функции $F(x)$, $h_i(x)$, $i \in J_m$ — выпуклые и дифференцируемые на Π_{ns}. Предлагается следующий гибридный подход к решению поставленной задачи оптимизации, совместно использующий метод штрафных функций и модификацию метода условного градиента.

Зададим семейство зависящих от некоторого параметра α_k функций $\varphi(x, \alpha_k)$, $k = 1, 2, \ldots$, определенных на Π_{ns} и удовлетворяющих классическим требованиям для штрафных функций. В соответствии с общей схемой метода штрафных функций [12, 13] зададим последовательности штрафных коэффициентов $\{\alpha_k\}_{k=1}^{\infty}$ и чисел $\{\varepsilon_k\}_{k=1}^{\infty}$, такие, что $\lim\limits_{k \to \infty} \dfrac{1}{\alpha_k} = 0$, $\lim\limits_{k \to \infty} \varepsilon_k = 0$.

При каждом k выберем точку x^k, удовлетворяющую условию:

$$F\left(x^k\right) + \varphi\left(x^k, \alpha_k\right) \leq \min_{x \in \Pi_{ns}} \left[F(x) + \varphi(x, \alpha_k) \right] + \varepsilon_k \, . \tag{14}$$

Конкретизируем задачу (14) и положим

$$\varphi(x, \alpha_k) = \alpha_k \sum_{i=1}^{m} \left[\max\left\{0, h_i(x)\right\} \right]^2 . \tag{15}$$

Для реализации метода штрафных функций с функцией штрафа вида (15) необходимо решать последовательность задач

$$\Phi(x, \alpha_k) = F(x) + \alpha_k \sum_{i=1}^{m} \left[\max\left\{0, h_i(x)\right\} \right]^2$$

на перестановочном многограннике Π_{ns}, т. е.

$$\Phi(x, \alpha_k) \to \min, \; x \in \Pi_{ns} \, , \tag{16}$$

где множество Π_{ns} задается системой (13).

Таким образом, $x^k = \arg\min_{\boldsymbol{x}\in\Pi_{ns}} \Phi\left(x,\alpha_k\right)$.

Тогда предельная последовательность решений $\left\{x^k\right\}_{k=1}^{\infty}$, построенная в соответствии с условием (14), сходится к решению задачи (9), (10), (13).

Остановимся на вопросе решения задачи (16). Нетрудно видеть, что речь идет о минимизации выпуклой дифференцируемой функции на множестве, заданном системой линейных ограничений (13). Однако количество ограничений неполиномиально и имеет в общем случае оценивается числом 2^n. Поэтому для больших размерностей применение классических методов решения оптимизационных задач на перестановочном многограннике Π_{ns} существенно затруднено.

Вместе с тем задача оптимизации линейных функций на Π_{ns} обладает следующим интересным свойством.

Минимум линейной функции $\varphi\left(x\right)=\sum_{i=1}^{n} c_i x_i$ на множестве Π_{ns} достигается в точке $x^*=\left(x_1^*,...,x_n^*\right)$, где $x_{\pi_i}^*=a_i$, $i\in J_n$, а $\pi=\left(\pi_1,...,\pi_n\right)$ — перестановка первых n натуральных чисел, такая, что $c_{\pi_i}\geq c_{\pi_{i+1}}$, $i\in J_{n-1}$. Указанное свойство позволяет предложить следующую модификацию метода условного градиента [12, 13] для решения задачи (16). Как известно, на каждом шаге данного итерационного метода при определении направления убывания функции решается вспомогательная задача оптимизации линейной функции, коэффициентами которой являются компоненты градиента функции $\Phi\left(x,\alpha_k\right)$ в соответствующей точке. В свою очередь, задача оптимизации линейной функции на перестановочном многограннике Π_{ns} сводится к упорядочению ее коэффициентов.

В качестве начальной точки предлагается выбирать внутреннюю точку многогранника Π_{ns}:

$$x^0=\left(x_1^0,...,x_n^0\right),\ x_i^0=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} a_j,\ i\in J_n.$$

Заметим, что в силу выпуклости и дифференцируемости функций $\Phi\left(x,\alpha_k\right)$, а также свойств множества Π_{ns} и особенностей решения вспомогательных линейных задач на нем, можно утверждать о сходимости итерационного процесса к глобальному решению задачи (16).

Выводы и обсуждение результатов. Полученные результаты представляют самостоятельный интерес с точки зрения решения условных задач оптимизации на перестановочном многограннике с учетом функциональных ограничений. С другой стороны, описанные задачи можно рассматривать как релаксационные в различных схемах комбинаторной оптимизации. Более того, используя результаты по непрерывному функциональному представлению дискретных структур, можно выделить новые классы задач комбинаторной оптимизации, для решения которых применимы описанные выше гибридные схемы. В первую очередь речь идет о классе полиэдрально-сферических множеств, представимых в виде пересечения комбинаторного многогранника и гиперсферы. Используя уравнение гиперсферы при формировании штрафной функции, имеем аналогичную постановку задачи и, следовательно, возможность применения представленных результатов для решения такого класса задач.

Список использованной литературы:

1. Korte B., Vygen J. Combinatorial Optimization: Theory and Algorithms. Heidelberg; New York: Springer Berlin, 2002. 660 p.
2. Сергиенко И. В., Шило В. П. Задачи дискретной оптимизации: проблемы, методы решения, исследования. К.: Наук. думка, 2003. 261с.
3. Згуровский М. З., Павлов А. А. Труднорешаемые задачи комбинаторной оптимизации в планировании и принятии решений. К.: Наук. думка, 2016. 115 с.
4. Гуляницький Л. Ф., Мулеса О. Ю. Прикладні методи комбінаторної оптимізації: навчальний посібник. К: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2016. 142 с.
5. Стоян Ю. Г., Яковлев С. В. Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования. К.: Наук. думка, 1986. 268 с.
6. Стоян Ю. Г., Ємець О. О. Теорія і методи евклідової комбінаторної оптимізації. К.: Ін-т системн. дослідж. освіти, 1993. 188 с.
7. Грицик В. В., Кісельова О. М., Яковлев С. В., Стецюк П. И. та інші. Математичні методи оптимізації та інтелектуальні комп'ютерні технології моделювання складних процесів і систем з урахуванням просторових форм об'єктів: монографія. Донецьк: Наука і освіта, 2012. 480 с.
8. Яковлев С. В. Теория выпуклых продолжений функций на вершинах выпуклых многогранников. *Вычислительная математика и математическая физика*. 1994. 34 (7). С. 1112–1119.
9. Pichugina O., Yakovlev S. Convex extensions and continuous functional representations in optimization, with their applications. *J. Coupled Syst. Multiscale Dyn*. 2016. 4 (2). P. 129–152.
10. Пічугіна О. С. Опукле продовження кубічних многочленів на переставленнях та його застосування у розв’язанні практичних задач оптимізації. Математичне та комп’ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки. 2010. Вип. 4. С. 176–189.
11. Емеличев В. А., Ковалев М. М., Кравцов М. К. Многогранники, графы, оптимизация (комбинаторная теория многогранников). М.: Наука, 1981. 344 с.

12. Бейко И. В., Бублик Б. Н., Зинько П. Н. Методы и алгоритмы решения задач оптимизации. К.: Вища школа, 1983. 512 с.
13. Bertsekas D. P. Nonlinear Programming. Belmont: Athena Scientific, 1995. 378 p.

A general problem statement of constrained optimization over a discrete vertex located set E is posed. An optimization problem with convex objective function and convex inequality-constraints equivalent on *E* to original is formulated, based on the convex extensions theory. A hybrid approach to optimization over the permutation polyhedron is presented. It uses jointly the penalty method and a modification of the conditional gradient method. A convergence of the method to the global solution is justified.

Key words: *a vertex located set, a convex extension, the permutohedron, the penalty method, the method of conditional gradient.*

получено 24.02.2017

УДК 519.6

О. В. Попов, канд. фіз.-мат. наук, с. н. с.,
О. В. Рудич, науковий співробітник

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ

ДО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ РІВНЯНЬ НА КОМП'ЮТЕРАХ ГІБРИДНОЇ АРХІТЕКТУРИ

Запропоновано методологію розв'язування розріджених систем лінійних алгебраїчних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури, яка використовує алгоритми структурної регуляризації та декомпозиції розріджених даних для приведення матриці системи до блочно-розрідженого вигляду.

Ключові слова: *системи лінійних алгебраїчних рівнянь, розріджені матриці, комп'ютери гібридної архітектури, структурна регуляризація розріджених даних, декомпозиція розріджених даних.*

Вступ. При чисельному моделюванні часто виникають, наприклад, при використанні тривимірних моделей, розрахункові (дискретні або напівдискретні) задачі з надвеликою кількістю рівнянь, яка може перевищувати 10^7. Причому дані (матриці) цих задач мають розріджену структуру, тобто кількість ненульових елементів значно менша (приблизно дорівнює *kn*, де *n* — порядок матриці, а $k << n$) загальної кількості елементів матриці. Зберігання таких даних, незважаючи на розрідженість, потребує значних обсягів комп'ютерної пам'яті, які можуть перевищувати 1 Tb.

Зростання параметрів задач, що розв'язуються, розрахунок на комп'ютерах більш повних моделей об'єктів, процесів, явищ вимагає відповідного зростання продуктивності комп'ютерів. Вимоги до високо-

 © О. В. Попов, О. В. Рудич, 2017