

РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ С СИММЕТРИЧНЫМИ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ОПРЕДЕЛЕННЫМИ МАТРИЦАМИ МЕТОДОМ СОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ¹

Пержабинский Сергей Михайлович, Филатов Александр Юрьевич
(Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева, e-mail: fial@isem.sei.irk.ru)

В работе исследуется возможность решения систем линейных уравнений с симметричными положительно определенными матрицами итеративными методами, в частности, методом сопряженных направлений. Данная задача представляет основную вычислительную сложность на каждой итерации алгоритмов внутренних точек для задач математического программирования и систем неравенств, и ускорение ее решения ускоряет работу всего алгоритма. Более того, специфика алгоритмов внутренних точек позволяет решать задачу приближенно. Поэтому использование алгоритмов, принципиально отличающихся от метода Халецкого, может оказаться перспективным. В работе дано описание алгоритма, а также приведены результаты экспериментального исследования на тестовых задачах.

В алгоритмах внутренних точек (например, [1]) для задач линейного программирования, систем линейных неравенств и нелинейных задач, решаемых с помощью методов линеаризации [2], итеративный переход на каждой итерации $k = 1, 2, \dots$ осуществляется по формуле $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \lambda_k \Delta \mathbf{x}^k$, где λ_k – шаг корректировки, а $\Delta \mathbf{x}^k$ – направление корректировки.

Для вычисления направления $\Delta \mathbf{x}^k$ требуется найти вектор \mathbf{u}^k двойственных оценок, решив задачу

$$\mathbf{A} \mathbf{D}_k \mathbf{A}^T \mathbf{u} = \mathbf{r}^k. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{A} – матрица размерности $m \times n$ ($\text{rank } \mathbf{A} = m$) ограничений $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ исходной задачи, \mathbf{D}_k – диагональная матрица положительных весовых коэффициентов порядка n , а $\mathbf{r}^k \in \mathbf{R}^m$ – вектор правых частей, меняющиеся по итерациям.

¹ Исследования выполнены при финансовой поддержке интеграционного проекта СО РАН №6, выполняемого в содружестве с учеными УрО РАН, и Фонда содействия отечественной науке.

Системы линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей $\mathbf{A}\mathbf{D}_k\mathbf{A}^T$ размерности $m \times m$ можно решать точными методами, в частности, методом Халецкого, для чего требуется около $m^3/2$ арифметических операций. Альтернативой является использование итеративных методов, одним из которых является метод сопряженных направлений.

Задача (1) эквивалентна задаче безусловной минимизации квадратичной функции

$$f(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{B} \mathbf{u} - \mathbf{r}^T \mathbf{u}, \quad (2)$$

где $\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{D}_k\mathbf{A}^T$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}^k$.

Начиная с некоторого произвольно выбранного приближения \mathbf{u}^0 , находим на каждой итерации $t = 1, 2, \dots$ метода сопряженных направлений вектор

$$\Delta \mathbf{u}^t = \nabla f(\mathbf{u}^{t-1}) - \beta_t \Delta \mathbf{u}^{t-1} = \mathbf{B} \mathbf{u}^{t-1} - \mathbf{r} - \beta_t \Delta \mathbf{u}^{t-1}, \quad (3)$$

где способ определения шага β_t задает тот или иной вариант метода. В нашей работе на первой итерации $\beta_1 = 0$, далее зададим

$$\beta_t = \frac{(\mathbf{B} \mathbf{u}^{t-1} - \mathbf{r})^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^{t-1}}{(\Delta \mathbf{u}^{t-1})^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^{t-1}}. \quad (4)$$

Итеративный переход осуществляется по формуле

$$\mathbf{u}^t = \mathbf{u}^{t-1} + \alpha_t \Delta \mathbf{u}^t, \quad (5)$$

где шаг α_t находим как решение задачи одномерной минимизации функции $f(\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t)$:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t) &= \frac{1}{2} (\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t)^T \mathbf{B} (\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t) - \mathbf{r}^T (\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t) = \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{u}^{t-1})^T \mathbf{B} \mathbf{u}^{t-1} + \alpha (\mathbf{u}^{t-1})^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^t + \frac{1}{2} \alpha^2 (\Delta \mathbf{u}^t)^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^t - \mathbf{r}^T \mathbf{u}^{t-1} - \alpha \mathbf{r}^T \Delta \mathbf{u}^t \rightarrow \min_{\alpha}. \end{aligned}$$

Найдем конкретное выражение для α_t , приравняв производную к нулю:

$$\frac{\partial f(\mathbf{u}^{t-1} + \alpha \Delta \mathbf{u}^t)}{\partial \alpha} = (\mathbf{u}^{t-1})^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^t + \alpha (\Delta \mathbf{u}^t)^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^t - \mathbf{r}^T \Delta \mathbf{u}^t = 0,$$

$$\alpha_t = -\frac{(\mathbf{B}\mathbf{u}^{t-1} - \mathbf{r})^T \Delta \mathbf{u}^t}{(\Delta \mathbf{u}^t)^T \mathbf{B} \Delta \mathbf{u}^t}. \quad (6)$$

Известно (например, из [3]), что метод сопряженных направлений (3)–(6), начиная с произвольно выбранного \mathbf{u}^0 , получает точку безусловного минимума \mathbf{u}^* квадратичной функции (2) не более, чем за m итераций. Вектор \mathbf{u}^* удовлетворяет условию (1). В то же время специфика алгоритмов внутренних точек позволяет решать задачу (1) приближенно. Действительно, на первых итерациях достаточно [4] искать направление корректировки $\Delta \mathbf{x}^k$, используя вектор \mathbf{u}^k , для которого $\mathbf{A}\mathbf{D}_k\mathbf{A}^T\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{r}}^k \neq \mathbf{r}^k$, а на финальной стадии вычислительного процесса, где важна высокая точность, диагональная матрица весовых коэффициентов \mathbf{D}_k изменяется по итерациям крайне незначительно. Таким образом в методе сопряженных направлений имеется хорошее стартовое приближение $\mathbf{u}^0 = \mathbf{u}^{k-1}$, полученное как решение задачи (1) на предыдущей итерации алгоритма внутренних точек.

Дополнительным преимуществом метода сопряженных направлений относительно метода Халецкого является то, что формулы (3)–(6) легко адаптируются к работе с разреженными матрицами, что позволяет существенно повысить максимальную размерность решаемых задач.

Условия останова метода сопряженных направлений могут быть различными. Например, $\|\mathbf{B}\mathbf{u}^t - \mathbf{r}\| \leq \varepsilon$ при заданном $\varepsilon > 0$.

Экспериментальное исследование метода сопряженных направлений проводилось на нескольких сериях из 50 тестовых задач вида (1) различной размерности (до 300×300). Матрицы \mathbf{B} генерировались следующим образом: сначала создавалась матрица \mathbf{A} и диагональная матрица \mathbf{D} , составленные из случайных целых чисел $a_{ij} \in [-5; 4]$, $d_{ii} \in [5; 15]$ затем находилось произведение $\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{D}\mathbf{A}^T$. Векторы \mathbf{r} формировались из случайных целых чисел $r_i \in [-500; 499]$.

В качестве начального приближения метода сопряженных направлений использовался вектор $\mathbf{u}^0 = \mathbf{e}$, состоящий из единиц. Таким образом, исследовался наихудший случай, когда полностью отсутствует стартовая

точка, предполагающаяся близкой к решению системы (1). Критерием остановки было условие $\|\mathbf{Bu}^t - \mathbf{r}\| \leq 0,01$. Если за 1000 итераций решение методом сопряженных направлений не было найдено, задача считалась нерешенной.

Эксперименты отличались соотношением между числом строк и столбцов в матрице \mathbf{A} . В первом эксперименте $m = n$. Его результаты (минимальное, максимальное и среднее число итераций, среднеквадратическое отклонение числа итераций, а также количество нерешенных задач) сведены в табл.1.

Таблица 1. Число итераций, необходимое для решения задач при $m = n$

Размерность m	Число итераций			Средне- квadr. отклонение	Нерешенные задачи
	Миним.	Максим.	Среднее		
10	10	11	10,04	0,19	0
30	73	967	293,80	230,61	18
50	164	927	429,36	220,70	25
100	383	999	713,20	186,74	40
300	–	–	–	–	50

Как видно из таблицы, метод сопряженных направлений показал низкую эффективность. Причиной неудовлетворительных результатов стала высокая чувствительность метода к накоплению ошибок, а также далекое от решения начальное приближение \mathbf{u}^0 .

Посмотрим, как метод работает в ситуации, когда $m < n$. Результаты второго эксперимента, сведенные в табл.2, справедливы для $n = 1,2m$.

Таблица 2. Число итераций, необходимое для решения задач при $n = 1,2m$

Размерность m	Число итераций			Средне- квadr. отклонение	Нерешенные задачи
	Миним.	Максим.	Среднее		
10	10	10	10	0	0
30	30	61	39,78	6,98	0
50	47	71	56,98	5,58	0
100	71	89	79,06	4,17	0
300	187	253	219,48	14,04	0

Увеличим разницу между m и n . Положим $n = 1,5m$. Результаты третьего эксперимента сведем в табл.3:

Таблица 3. Число итераций, необходимое для решения задач при $n = 1,5m$

Размерность m	Число итераций			Средне- квadr. отклонение	Нерешенные задачи
	Миним.	Максим.	Среднее		
10	10	10	10	0	0
30	24	35	29,04	2,11	0
50	34	44	39,26	1,93	0
100	47	58	51,14	1,98	0
200	55	65	60,54	2,35	0

Итоги второго и, особенно, третьего эксперимента (при увеличении различий между m и n скорость получения решения увеличивается, нерешенные задачи отсутствуют) подтверждают пригодность метода даже для решения отдельных задач вида (1). С учетом же указанных выше особенностей алгоритмов внутренних точек, а также того, что число переменных в практических задачах, как правило, вдвое и более превышает число ограничений, можно утверждать, что использование итеративных методов, в том числе, метода сопряженных направлений для решения вспомогательной задачи (1), является одним из наиболее перспективных способов ускорения алгоритмов внутренних точек.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зоркальцев В.И., Филатов А.Ю. Комбинированные алгоритмы внутренних точек для задач линейного программирования // Труды XIII Байкальской международной школы-семинара “Методы оптимизации и их приложения” – Иркутск, 2005.
2. Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. – 319с.
3. Аоки М. Введение в методы оптимизации. М.: Наука, 1977. – 343с.
4. Зоркальцев В.И. Решение систем линейных неравенств алгоритмами внутренних точек // “Современные методы оптимизации и их приложения к моделям энергетики”: сб. науч. тр. – Новосибирск: “Наука”, 2003. – с. 110–141.