УДК 519.8

АЛГОРИТМИ ІТЕРАЦІЙНОГО КВАДРАТИЧНОГО ПРОГРАМУВАННЯ ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО РОЗПОДІЛУ ПОТОКІВ

О.Є. КІРІК

Розглянуто задачу квадратичного програмування, що служить допоміжною при розв'язанні нелінійних задач розподілу потоків. Вона зводиться до безумовної двоїстої задачі з неперервно диференційованою кусково-квадратичною цільовою функцією. Замість максимізації цієї неявної функції проводиться послідовна максимізація конкретних квадратичних функцій, побудованих таким чином, аби в кінці ітераційної процедури домогтися співпадіння отриманого розв'язку з точкою максимуму двоїстої задачі.

ВСТУП

При зростаючих потребах суспільства в енергетичних ресурсах стає необхідною наявність відповідних інформаційних ресурсів, які б забезпечували якісний, швидкий та зручний розрахунок мереж. Одна з центральних задач дослідження мереж — оптимальний розподіл потоків — має самостійне значення, але може розглядатися і в комплексі більш загальних задач, наприклад, пов'язаних із проектуванням мереж або розрахунком їх параметрів.

На відміну від лінійних транспортних задач, задачі оптимізації енергетичних систем можуть мати різноманітні нелінійні цільові функції, що обумовлює широкий вибір методів їх розрахунків. Одними з найперспективніших методів нелінійного програмування вважаються методи послідовного квадратичного програмування (SQP). Їх ще називають методами ітераційного квадратичного програмування або рекурсивного квадратичного програмування. Засновані на роботах [1–3] методи SQP дозволяють достатньо точно імітувати метод Ньютона для оптимізації за наявності обмежень, як це зроблено в оптимізації без обмежень. На кожній основній ітерації здійснюється квадратична апроксимація функції Лагранжа основної задачі та будується задача квадратичного програмування, розв'язок якої використовується для формування напрямку в процедурі лінійного пошуку. К. Шитковський [4, 5] успішно реалізував та провів тестові розрахунки за методами SQP і отримав всебічну перевагу порівняно з іншими методами по ефективності, точності та проценту успішного розв'язання задач для великої кількості тестових прикладів.

Стаття, що пропонується вашій увазі, є продовженням досліджень, розпочатих у роботах [6, 7], присвячених розв'язанню нелінійних задач розподілу потоків із застосуванням методу лінеаризації Б.М. Пшеничного та його модифікацій [8, 9]. Ці методи знайшли світове визнання і мають дуже широкий спектр застосувань. В методах Б.М. Пшеничного відбувається заміна розв'язання нелінійної задачі розв'язанням послідовності квадратичних задач, цільові функції яких є квадратичною апроксимацією цільової функції вихідної задачі або її лінійною апроксимацією з додаванням квадратичного штрафу за великі ухилення аргументу.

Відмітимо, що завдяки особливостям структури задач розподілу потоків, а саме наявності лінійних обмежень, квадратична апроксимація функції Лагранжа для цих задач співпадає з квадратичною апроксимацією їх цільових функцій. Це означає, що при виборі відповідного методу обчислення крокового множника на основній ітерації алгоритму можна говорити про близькість оцінок ефективності методів Б.М. Пшеничного та SQP для такого класу задач.

Отже, загальний підхід до нелінійних задач оптимізації за наявності обмежень полягає в заміні вихідної задачі з обмеженнями на іншу, яка розв'язується простіше і може служити основою для побудови деяких ітераційних процесів. Найчастіше нелінійну задачу заміняють набором певним чином побудованих задач квадратичного програмування. Оскільки успішне здійснення такої заміни є неможливим без ефективного розв'язання цих допоміжних задач, постійний інтерес викликають ефективні методи квадратичного програмування.

При розв'язанні допоміжних квадратичних задач звичайно переходять до двоїстих задач без обмежень. В класичних задачах розподілу потоків існують два типи обмежень: обмеження-рівності, які є аналогом рівнянь Кірхгофа, та технологічні обмеження на пропускну спроможність мережі. У деяких роботах [10] звільнення від обмежень відбувається шляхом побудови штрафної функції з простими обмеженнями, а обмеження-рівності виключаються через виділення базису, як в алгоритмах лінійного програмування. Нижче ми пропонуємо перехід до допоміжної задачі без обмежень здійснювати шляхом залучення у функцію Лагранжа обмежень-рівностей з подальшою її мінімізацією на множині простих обмежень.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Розглянемо енергетичну систему, яка має структуру мережі. Моделлю конфігурації такої системи є граф [11]. Споживачі та розподільчі станції розташовані у вершинах (вузлах) графа, транспортні ділянки відповідають його дугам. Задається така інформація: об'єм подачі речовини (газу, нафти, води) в систему, потреби споживачів, довжина ділянок розподільчої системи та технологічні обмеження на її пропускну спроможність. Потрібно розподілити потоки вздовж мережі таким чином, щоб задовольнити всіх споживачів із найменшими загальними витратами на доставку.

Відмітимо, що основні співвідношення математичної моделі задачі розподілу потоків навмисне обираються з достатньо загальних міркувань, аби охопити єдиним підходом різноманітні розподільчі системи.

Нехай граф $G=(N,V)$ містить n вершин (множина N) та m дуг (множина V). Кожній дузі $v \in V$ співставлена упорядкована пара вершин (i,j), $i,j \in N$, які є її початком і кінцем. Для кожної вершини i відоме споживання d_i, а кожній дузі графа v приписаний деякий потік x_v, обмежений знизу і зверху величинами r_v^- та r_v^+, та функція вартості протікання потоку $F_v(x_v)$ вздовж дуги.

Задача знаходження розподілу потоків мінімальної вартості може бути сформульована таким чином:

$$F(x) \equiv \sum_{v=1}^{m} F_v(x_v) \to \min , \tag{1}$$

$$Ax = d , \tag{2}$$

$${}^{-}r \le x \le r^{+} , \tag{3}$$

де $x = (x_1, x_2, ..., x_m)$ — вектор невідомих дугових потоків; $d = (d_1, d_2, ..., d_n)$ — вектор споживання у вузлах; $A\ (n \times m)$ — матриця інциденцій вузли–дуги. Кожен стовпець v цієї матриці відповідає дузі $v = (i, j)$, $i, j \in N$ та містить тільки два ненульових елементи: +1 у рядку i та –1 у рядку j.

Виконання співвідношень (2) гарантує задоволення всіх споживачів. Умова сумісності рівнянь (2) отримується їх додаванням і є умовою збалансованості системи.

$$\sum_{i=1}^{n} d_i = 0 . \tag{4}$$

Будемо вважати, що функція $F(\cdot)$ — двічі неперервно диференційована і $F_v''(x_v) > 0$ для всіх $v \in V$. За умови існування розв'язку остання умова гарантує його єдиність.

Цільова функція задачі (1) – (3) може бути представлена, наприклад, в інтегральному вигляді [12]

$$F(x) = \sum_{v=1}^{m} \int_0^{x_v} f_v(t)dt . \tag{5}$$

Тоді f_v — функція, що відображає умовну вартість протікання потоку x_v вздовж дуги v, а мінімізація (5) при обмеженнях (2),(3) дає найкращий з точки зору витрат на транспортування розподіл потоків вздовж мережі.

Перейдемо до розв'язання цієї задачі.

АЛГОРИТМИ ОПТИМІЗАЦІЇ

Якщо x^0 — початкове наближення до розв'язку нелінійної задачі (1) – (3), то для реалізації ітераційного процесу

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k , \quad 0 < \alpha_k \le 1 \tag{6}$$

у кожній точці x^k знаходимо напрям зсуву $p^k = p(x^k) \in R^m$ як розв'язок при фіксованому $x = x^k \in R^m$ допоміжної квадратичної задачі:

$$W(p) \equiv \frac{1}{2}\langle p, Dp \rangle + \langle c, p \rangle \to \min , \tag{7}$$

$$Ap = \widetilde{d} , \tag{8}$$

$$\widetilde{r}^{-} \le p \le \widetilde{r}^{+} . \tag{9}$$

Тут $c = F'(x)$ — градієнт функції $F(x)$; $D = F''(x)$ — матриця її других похідних (або одинична матриця у випадку методу лінеаризації); $\widetilde{d} = d - Ax$, $\widetilde{r}^{-} = r^{-} - x$, $\widetilde{r}^{+} = r^{+} - x$, $\langle x, p \rangle$ — скалярний добуток.

Припускаємо, що розв'язок допоміжних задач (7) – (9) існує для всіх точок процесу (6). Критерій завершення процесу — це виконання умови $p = 0$.

Побудуємо задачу, двоїсту до (7) – (9). Нехай $u \in E^{n}$ — вектор двоїстих змінних, які відповідають обмеженням (8). Випишемо функцію Лагранжа

$$L(p,u) = \frac{1}{2}\langle p, Dp \rangle + \langle c, p \rangle + \left\langle u, Ap - \widetilde{d} \right\rangle .$$

Згідно із теорією двоїстості [8] розв'язання задачі (7) – (9) еквівалентне максимізації вгнутої неперервно диференційованої функції

$$\max_{u \in E^{n}} H(u), \tag{10}$$

де

$$H(u) = \min_{-\widetilde{r}^{-} \le p \le \widetilde{r}^{+}} L(p,u). \tag{11}$$

Більшість методів оптимізації вимагає для своєї реалізації знання не тільки значення функції, але й її похідних. Згідно із теоремою про похідну від функції мінімуму [13] функція $H(u)$ має неперервну похідну, яку можна обчислити для довільної точки u. Ця похідна дорівнює значенню похідної від $L(p,u)$ по u, взятому у точці мінімуму $p^{*}(u)$

$$H'(u) = Ap^{*}(u) - \widetilde{d} .$$

Для максимізації гладкої вгнутої функції (10) може бути застосований довільний метод безумовної оптимізації, зокрема метод спряжених градієнтів [8].

Алгоритм спряжених градієнтів для вгнутої функції. Наведемо основні формули для пошуку максимуму вгнутої функції $H(u)$, $u \in E^{n}$, враховуючи, що ця процедура еквівалентна пошуку мінімуму опуклої функції $-H(u)$.

Процес починається з початкової точки u^{0} . Послідовні наближення u^{k} до оптимальної точки одержуються за рекурентними формулами

$$u^{k+1} = u^{k} + \beta_{k} z^{k} ,$$

де

$$z^0 = H'\left(u^0\right), \quad z^k = H'\left(u^k\right) + \frac{\left\langle H'\left(u^k\right), H'\left(u^k\right) - H'\left(u^{k-1}\right)\right\rangle}{\left\langle H'\left(u^{k-1}\right), z^{k-1}\right\rangle} z^{k-1}, \quad k > 0\,. \quad (12)$$

Вибір множника β_k на кожному k кроці здійснюється з вимоги

$$H\left(u^k + \beta_k z^k\right) = \max_{\beta \geq 0} H\left(u^k + \beta z^k\right), \quad (13)$$

$$k = 0,1,2,...$$

При максимізації неквадратичних функцій метод спряжених градієнтів із скінченного стає ітераційним. У такому випадку після $(n+1)$-ї ітерації процедури циклічно повторюються із заміною u^0 на u^{n+1}, а обчислення закінчуються, коли градієнт $H'(u)$ обертається в нуль з певною точністю.

Дослідження структури двоїстої задачі. Поглянемо тепер, як, використовуючи необхідні умови екстремуму [13], можна конкретизувати вигляд функції $H(u)$.

Мінімум у виразі (11) з урахуванням простих двосторонніх обмежень (9) досягається у точці $p(u) \in E^m$ з компонентами $p_i(u)$

$$p_i = \begin{cases} \tilde{r}_i^{\,+}, & \text{якщо} \quad \tilde{u}_i \geq \tilde{r}_i^{\,+}, \\ \tilde{u}_i, & \text{якщо} \quad \tilde{r}_i^{\,-} < \tilde{u}_i < \tilde{r}_i^{\,+}\,, \\ \tilde{r}_i^{\,-}, & \text{якщо} \quad \tilde{u}_i \leq \tilde{r}_i^{\,-}, \end{cases} \quad (14)$$

$$i = 1,2,...,m\,.$$

Тут $\tilde{u}_i = D_i^{-1}\left(c + A^T u\right)$, а D_i^{-1} — i-та строка матриці D^{-1}.

Ця формула зв'язку двоїстих змінних з вихідними дозволяє представити цільову функцію задачі (10) у такому вигляді:

$$H(u) = -\frac{1}{2}\langle h(u), Dh(u)\rangle - \left\langle \tilde{d}, u\right\rangle, \quad (15)$$

де $h(u) = \left(p_1(u), p_2(u,)...p_m(u)\right)^T$.

Замість максимізації неявної функції $H(u)$ будемо проводити послідовну максимізацію конкретних квадратичних функцій, побудованих таким чином, аби в кінці ітераційної процедури домогтися співпадіння отриманого розв'язку з точкою максимуму функції $H(u)$.

Позначимо $M = \left\{p : \tilde{r}^{\,-} \leq p \leq \tilde{r}^{\,+}\right\}$ множину точок, що утворюються наборами простих обмежень задачі (7)–(9). Як було показано вище, розв'язання цієї задачі можна замінити розв'язанням двоїстої задачі

$$\max_{u \geq 0} \min_{p \in M} L(p,u),$$

розмірність якої визначається числом обмежень-рівностей.

Нехай $p(\bar{u})$ — результат розв'язання при фіксованому $u = \bar{u}$ задачі

$$L(p,u) \to \min\,, \tag{16}$$

$$p \le \tilde{r}^{+}\,, \tag{17}$$

$$-p \le -\tilde{r}^{-}\,, \tag{18}$$

а $\lambda^{+}(\bar{u}) \ge 0$ та $\lambda^{-}(\bar{u}) \ge 0$ — вектори множників Лагранжа цієї задачі, що відповідають обмеженням (17) та (18).

Якщо $\bar{p} \in M$ — довільна допустима точка, то серед обмежень (17),(18) можна виділити ті, що задовольняються як рівності.

Означення 1. Нехай є множина точок, що описується системою нерівностей. Гранню цієї множини назвемо підмножину, яка визначається набором обмежень, що задовольняються як рівності.

Покладемо

$$J^{+}(\bar{p}) = \left\{ i : I_i \bar{p} = \tilde{r}_i^{+} \right\},\; J^{-}(\bar{p}) = \left\{ i : I_i \bar{p} = \tilde{r}_i^{-} \right\},$$

де I_i — i-та строка одиничної матриці I.

Структура множини M гарантує виконання умови невиродженості: для наборів індексів $J(\bar{p}) = J^{+}(\bar{p}) \cup J^{-}(\bar{p})$, що породжуються довільною допустимою точкою $\bar{p}$, вектори I_i, $i \in J(\bar{p})$ є лінійно незалежними, оскільки жодна компонента вектора $\bar{p}$ не може одночасно досягати своєї верхньої та нижньої межі.

Введемо означення регулярності.

Означення 2. Нехай при фіксованому $\bar{u}$ задачі (16) – (18) розв'язані, знайдені оптимальні точки $\bar{p} = p(\bar{u})$ та множини індексів активних обмежень $J^{+}(\bar{p})$ та $J^{-}(\bar{p})$.

Точка $\bar{u}$ називається регулярною, якщо множники Лагранжа, що відповідають активним обмеженням, є строго додатними $\lambda_i^{+}(\bar{u}) > 0$, $i \in J^{+}(\bar{p})$; $\lambda_i^{-}(\bar{u}) > 0, i \in J^{-}(\bar{p})$.

Означення 3. Нехай для регулярної точки $\bar{u}$ визначені набори активних обмежень J^{+} та J^{-}. Підмножина множини регулярних точок u, що належать околу $\bar{u}$, якому відповідає даний фіксований набір активних обмежень та незмінні знаки множників Лагранжа $\lambda_i^{+}(\bar{u}) > 0$, $i \in J^{+}$; $\lambda_i^{-}(\bar{u}) > 0, i \in J^{-}$, називається регулярною областю для функції $H(u)$.

Систему активних обмежень можна записати у вигляді $I_J p = r_J$, де I_J — одинична матриця з вилученими рядками, що відповідають неактивним обмеженням; r_J — вектор, який складається з відповідних компонент верхніх та нижніх границь вектора p.

Лема. У кожній регулярній області функція $H(u)$ є квадратичною.

Доведення. Функція $L(p,u)$ є строго опуклою по p та диференційованою по u. Мінімум $L(p,u)$ досягається в єдиній точці $p(u)$.

Для регулярної точки u необхідні умови екстремуму задачі

$$\min_{p \in M} L(p,u) \tag{19}$$

можуть бути виписані у такій формі:

$$c + Dp + A^T u + I_J^T \lambda_J = 0 ,$$

$$I_J p = r_J , \ \lambda_J > 0 ,$$

де λ_J — вектор, який складається з компонент векторів λ^+ та λ^-, що відповідають активним компонентам вектора p.

Звідси

$$p = -D^{-1}(I - E_J)\left(A^T u + c\right) - D^{-1} E_J D r_J , \tag{20}$$

$$\lambda_J = -E_J\left(A^T u + c + D r_J\right), \tag{21}$$

де $E_J = I_J^T \left(I_J I_J^T\right)^{-1} I_J$.

Використовуючи вираз для градієнта $H'(u) = Ap(u) - \widetilde{d}$ та формулу (20), отримаємо, що для тих u, при яких матрицею активних обмежень задачі (16)–(18) є I_J

$$H_J(u) = -\frac{1}{2}\left\langle AD^{-1}(I - E_J)A^T u, u\right\rangle - \left\langle d_J, u\right\rangle, \tag{22}$$

де $d_J = D^{-1}(I - E_J)c + D^{-1} E_J D r_J + \widetilde{d}$.

Таким чином, ми визначили вигляд функції $H(u)$ всередині регулярної області. В цілому функція $H(u)$ — вгнута, гладка, кусково-квадратична, причому перехід від однієї квадратичної складової до іншої здійснюється під час переходу від однієї регулярної області до іншої. Функція $H(u)$ є неперервною, але в місцях переходів можливі розриви її похідних.

У процесі максимізації $H(u)$ доцільно використовувати її конкретний вигляд в областях регулярності.

Максимізація квадратичної функції в регулярній області. Відповідно до означення 3, кожна регулярна область для функції $H(u)$ визначається співвідношеннями

$$I_J p = r_J , \ \lambda_J > 0 . \tag{23}$$

Всередині області вигляд функції $H(u)$ може бути конкретизований за допомогою формули (22).

Для максимізації цієї конкретної квадратичної функції можна застосовувати метод спряжених градієнтів для квадратичних функцій, що збігається за скінченне число кроків. Однак цей процес не повинен виводити за межі регулярної області, де функція $H(u)$ має інший вигляд. Якщо в деякій точці вздовж обраного напрямку одне з неактивних обмежень обертається на рівність або один з множників Лагранжа, які відповідають активним обмеженням, стає рівним нулю, то це може служити ознакою виходу на межу регулярної області. Для відповідного контролю можуть використовуватися формули залежності p та λ від u (20), (21).

Процедура виходу з нерегулярної точки. В нерегулярних точках відбувається гладке поєднання різних квадратичних функцій, що утворюють функцію $H(u)$. Для виходу з нерегулярної точки робимо крок у напрямку, в якому значення функції $H(u)$ строго зростає. Оскільки функція $H(u)$ є диференційованою, то можемо зробити крок в напрямку градієнта $H'(u)$, або крок алгоритму спряжених градієнтів (12). Цей метод також вимагає знання тільки перших похідних функції, а збігається, взагалі кажучи, за менше число ітерацій, ніж метод найскорішого спуску. При цьому для вибору кроку необхідно реалізувати процедуру одновимірного пошуку (13).

Алгоритм розв'язання кусково-квадратичної задачі. Обираємо як початкову довільну точку u^0.

Перевіряємо, чи є точка u^0 регулярною. Для цього розв'язуємо задачі, двоїсті до (16)–(18) при $u = u^0$:

$$W(\lambda^+, \lambda^-) \to \max , \tag{24}$$

$$\lambda^+ \geq 0 ,$$

$$\lambda^- \geq 0 ,$$

де

$$W(\lambda^+, \lambda^-) = -\frac{1}{2}\left\langle D^{-1}(\lambda^+ - \lambda^-), \lambda^+ - \lambda^- \right\rangle - \left\langle D^{-1}\left(c + A^T u\right), \lambda^+ - \lambda^- \right\rangle -$$

$$- \left\langle \lambda^+, r^+ \right\rangle + \left\langle \lambda^-, r^- \right\rangle - e(u),$$

$$e(u) = -\frac{1}{2}\left\langle D^{-1}\left(c + A^T u\right), c + A^T u \right\rangle - \left\langle u, \widetilde{d} \right\rangle .$$

Знаходимо двоїсті змінні $\lambda_i^+(u^0)$, $\lambda_i^-(u^0)$, ($i = 1,2,\ldots,m$), оптимальні розв'язки $p = -D^{-1}\left(c + A^T u^0 + \lambda^+ - \lambda^-\right)$ і множини індексів $J^+(p)$ та $J^-(p)$.

Перевіряємо, чи є множники Лагранжа, що відповідають активним обмеженням, строго додатними.

Можливі два випадки.

1. Точка u^0 є регулярною. Розв'язуємо задачу квадратичного програмування

$$H_J(u) \equiv -\frac{1}{2}\left\langle AD^{-1}(I - E_J)A^T u, u \right\rangle - \left\langle d_J, u \right\rangle \to \max$$

методом спряжених градієнтів для квадратичних функцій [8]. Метод збігається за скінченне число кроків.

Для контролю за приналежністю точок u регулярній області на кожному кроці робимо таку перевірку. Обчислюємо

$$\overline{\alpha}_{k+1} = \min_i \left\{ -\frac{D_i^{-1}(I - E_J)\left(A^T u^k + c\right) + D_i^{-1} E_J D r_J + r_i}{D_i^{-1}(I - E_J) s^{k+1}}, i = 1,2,\ldots,m \right\} .$$

Мінімум береться по тих $i \notin J^+$, $i \notin J^-$, для яких $D_i^{-1}(I - E_J)s^{k+1} < 0$.

$$\overline{\overline{\alpha}}_{k+1} = \min_i \left\{ -\frac{(E_J)_i \left(A^T u^k + c\right) + (E_J)_i D r_J}{(E_J)_i s_i^{k+1}}, i = 1,2,...,m \right\}.$$

Мінімум береться по тих $i \in J^+, i \in J^-$, для яких $(E_J)_i s_i^{k+1} < 0$.

Тут u^k — чергова точка, яку отримуємо в процесі реалізації алгоритму спряжених градієнтів; s^{k+1} — вектор зсуву з цієї точки.

$$\widetilde{\alpha}_{k+1} = \min \left\{ \overline{\alpha}_{k+1}, \overline{\overline{\alpha}}_{k+1} \right\}.$$

Якщо α_{k+1} — відповідна довжина кроку спряжених градієнтів і виконується умова $\alpha_{k+1} < \widetilde{\alpha}_{k+1}$, то $u^{k+1} = u^k + \alpha_{k+1} s^{k+1}$, і процес продовжується. Якщо ж $\alpha_{k+1} \geq \widetilde{\alpha}_{k+1}$, то $u^{k+1} = u^k + \widetilde{\alpha}_{k+1} s^{k+1}$, і процес застосування методу спряжених градієнтів закінчено. У цьому випадку отриману точку обираємо початковою і далі працюємо з новою точкою так само, як з вихідною u^0.

2. Точка u^0 є нерегулярною. Застосовуємо процедуру виходу з нерегулярної точки.

Критерієм оптимальності служить виконання умови $H'(u) = 0$.

Зробимо зауваження щодо організації обчислень.

Зауваження 1. Константи $e(u) = -\frac{1}{2}\left\langle D^{-1}\left(c + A^T u\right), c + A^T u\right\rangle - \left\langle u, \widetilde{d}\right\rangle$ можна опустити, оскільки їх відкидання не змінює оптимальної точки.

Зауваження 2. Цільова функція задачі (24) є адитивно-сепарабельною. Це означає, що розв’язання цієї задачі легко замінити розв’язанням m двовимірних квадратичних задач:

$$-\frac{1}{2D_{ii}}\left(\lambda_i^+ - \lambda_i^-\right)^2 - \lambda_i^+\left(\widetilde{u}_i + r_i^+\right) + \lambda_i^-\left(\widetilde{u}_i + r_i^-\right) \to \max,$$

$$\lambda_i^+ \geq 0,$$

$$\lambda_i^- \geq 0,$$

$$i = 1,2,...,m.$$

У формулюванні цих задач використані введені раніше позначення $\widetilde{u}_i = D_i^{-1}\left(c + A^T u\right)$, а D_{ii} — діагональні елементи матриці D.

Обґрунтування збіжності. Наведений вище алгоритм визначає таку послідовність $\left\{u^k\right\}$ допустимих точок двоїстої задачі (10), вздовж якої значення функції $H(u)$ монотонно зростає. Розглянемо тільки ті точки цієї послідовності, які лежать у регулярних областях та є початковими для даної процедури.

Нехай u^k та u^m, $m > k$ — точки, які служать вихідними для процедури спряжених градієнтів у різних регулярних областях. Тоді множини номерів активних обмежень в цих областях є різними, тому що якби

$$J^+\left(p\left(u^k\right)\right) = J^+\left(p\left(u^m\right)\right), \ J^-\left(p\left(u^k\right)\right) = J^-\left(p\left(u^m\right)\right), \tag{25}$$

то $H\left(u^k\right) = H\left(u^m\right)$. Але відповідно до побудови процесу $H\left(u^k\right) < H\left(u^m\right)$ при $m > k$, так що рівностей (25) бути не може.

З другого боку, всі множини $J^+\left(p\left(u^k\right)\right)$, $J^-\left(p\left(u^k\right)\right)$ є підмножинами скінченних множин простих обмежень, і тому число таких підмножин є скінченним. Максимізація квадратичної функції в регулярній області відбувається за скінченне число кроків. Отже, після цього ми прийдемо в область, яка містить точку максимуму функції $H(u)$, бо інакше процес перебору регулярних областей можна було би продовжити.

Якщо ж всі точки побудованої послідовності $\{u^k\}$ є нерегулярними, то даний метод є просто реалізацією методу спряжених градієнтів (12),(13). Збіжність цього методу для вгнутих диференційованих функцій доведена у роботі [8].

Таким чином, дана процедура за скінченне число кроків приводить в окіл точки максимуму функції $H(u)$. Швидкість збіжності методу залежить від поведінки функції $H(u)$ в околі точки максимуму. Якщо ця точка є регулярною, то, виходячи з неперервної залежності p, λ^+ та λ^- від u, умови регулярності будуть виконуватися і в деякому її околі. Максимізація $H(u)$ в околі точки максимуму буде здійснюватися методом спряжених градієнтів для квадратичних функцій, що не вимагає процедури одновимірного пошуку. Якщо ж точка максимуму є нерегулярною, то вона буде досягатися зі швидкістю процесу (12),(13).

Теорема. Якщо точка максимуму $\bar{u}$ цільової функції двоїстої задачі (10) є регулярною, то метод збігається за скінченне число кроків. Якщо ж у точці $\bar{u}$ умови регулярності не виконуються, то процес збігається до точки $\bar{u}$ зі швидкістю методу спряжених градієнтів.

ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ АСПЕКТИ

Одне з важливих питань, від якого залежить ефективність алгоритмів — це спосіб збереження та обробки даних. Реальні енергетичні мережі містять дуже велику кількість об'єктів, але кожен з них пов'язаний з обмеженою групою інших об'єктів. Це означає, що матриця інциденцій мережі при своїх значних розмірах є дуже розрідженою і має специфічну структуру.

Яким би чином не задавалася інформація про мережу — графічно (рис. 1) або таблично (рис. 2) — в ході обчислень доцільно працювати тільки з ненульовими елементами. Оскільки матриця інциденцій, крім нульових, містить тільки одиничні елементи, при операціях з нею можна взагалі виключити процедури множення.

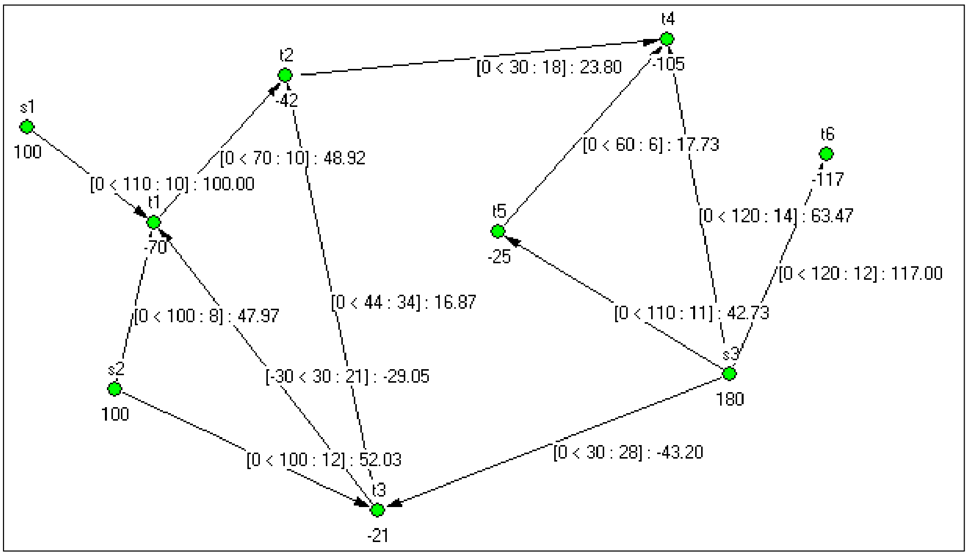
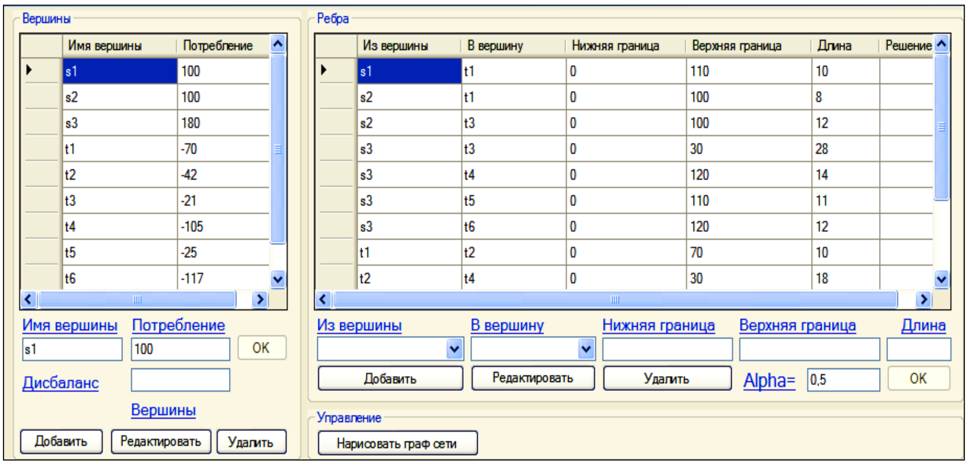


Рис. 1. Модельний приклад мережі: вузлові параметри — назва вузла, споживання у вузлі; дугові параметри — [нижня межа пропускної спроможності потоку < верхня межа пропускної спроможності потоку: довжина дуги]: обчислена величина потоку



Имя вершины	Потребление
s1	100
s2	100
s3	180
t1	-70
t2	-42
t3	-21
t4	-105
t5	-25
t6	-117

Из вершины	В вершину	Нижняя граница	Верхняя граница	Длина	Решение
s1	t1	0	110	10	
s2	t1	0	100	8	
s2	t3	0	100	12	
s3	t3	0	30	28	
s3	t4	0	120	14	
s3	t5	0	110	11	
s3	t6	0	120	12	
t1	t2	0	70	10	
t2	t4	0	30	18	

Рис. 2. Табличне представлення мережі

Інформація про структуру мережі може зберігатися у вигляді двох векторів $b=(b_1,b_2,...,b_m)$ та $e=(e_1,e_2,...,e_m)$, розмірність яких дорівнює кількості дуг мережі. Індекс компоненти масиву відповідає номеру дуги. У першому з масивів зберігаються номери вершин, звідки ці дуги виходять, у другому — номери вершин, куди вони входять. Якщо A — матриця інциденцій цієї мережі, а x — довільний вектор, то для кожної строки $i=1,2,...,n$

$$A_i x=\sum_s x_s-\sum_r x_r ,$$

причому в суму включаються тільки ті номери s та r, для яких $b_r=i$ та $e_s=i$.

Аналогічно для кожного $j = 1,2,...,m$

$$A_j^T x = x_s - x_r \text{, де } r = b_j , \quad s = e_j .$$

$E_J = I_J^T \left(I_J I_J^T\right)^{-1} I_J$ — це матриця проектування на деяку грань, яка визначається набором простих обмежень. У формулюванні алгоритму вона була всюди формально виписана. Але слід зауважити, що, виходячи з її конкретної структури, наведені в алгоритмах формули можуть бути суттєво спрощені. Оскільки $I_J I_J^T = I^{|J|}$ є одиничною матрицею розмірності $|J|$, то E_J є одиничною матрицею, в якій рядки, що відповідають неактивним обмеженням, просто замінені нульовими рядками. При обчисленні добутку цієї матриці на довільний вектор не треба виконувати операцію множення. Достатньо просто замінити відповідні елементи цього вектора на нульові.

$$\left(E_J z\right)_i = \begin{cases} z_i, & \text{якщо} \quad i \in J, \\ 0, & \text{якщо} \quad i \notin J. \end{cases}$$

ВИСНОВКИ

Досліджено задачу квадратичного програмування, що служить допоміжною при розв’язанні нелінійних задач розподілу потоків. Вона зводиться до двоїстої задачі без обмежень з кусково-квадратичною неперервно-диференційованою цільовою функцією, для розв’язання якої пропонується алгоритм, що є поєднанням процедур спряжених градієнтів для квадратичних та вгнутих функцій.

Природно виникає питання, чи не вигідніше було би в процесі розв’язання допоміжної квадратичної задачі переходити до двоїстої, включаючи в функцію Лагранжа всі обмеження. У цьому випадку теоретично ми завжди отримуємо розв’язок за скінченне число кроків. Такий підхід достатньо ретельно досліджувався у роботі [14]. Хоча за трудомісткістю загальної ітерації такі методи простіші, їх ефективність нівелюється за рахунок значного збільшення розмірності та чуттєвості алгоритмів до накопичення похибок обчислень.

У тестовому прикладі (см. рис. 1) задача розподілу потоків містить 9 обмежень-рівностей та 12 простих двосторонніх обмежень. Якщо вводити у функцію Лагранжа всі обмеження, то розмірність двоїстої допоміжної задачі буде дорівнювати 33. Якщо ж скористатися описаним вище алгоритмом, то на кожному основному кроці потрібно розв’язувати одну квадратичну задачу без обмежень розмірності 9-ти та дванадцять простих двовимірних задач.

У процесі реалізації побудованого алгоритму відбуваються розрахунки за процедурою спряжених градієнтів для квадратичних та нелінійних вгнутих функцій, причому заздалегідь невідомо, скільки кроків буде зроблено за кожним з цих методів. Звичайно, вони відрізняються трудомісткістю. Але й у найгіршому випадку, коли всі точки процесу є нерегулярними, це буде просто реалізацією методу спряжених градієнтів для вгнутих функцій, що вимагає процедури одновимірного пошуку на кожному кроці. За сприятливих обставин ми отримуємо розв'язок за скінченне число кроків.

Оскільки на відміну від багатьох інших методів, методи Б.М. Пшеничного добре справляються з нелінійними обмеженнями-рівностями, запропонований вище підхід доцільно розповсюдити на випадок потокових задач з нелінійними обмеженнями, що можуть розглядатися як варіант узагальнених рівнянь Кірхгофа. Це послужить основою для нового напрямку досліджень.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Biggs M.C.* Constrained Minimization Using Recursive Quadratic Programming // Towards Global Optimization (L.C.W. Dixon and G.P. Szergo, eds.). — North-Holland. — 1975. — P. 341–349.
2. *Han S.P.A.* Globally Convergent Method for Nonlinear Programming // J. Optimization Theory and Applications. — 1977. — **22**. — P. 297.
3. *Powell M.J.D.* Variable Metric Methods for Constrained Optimization. Mathematical Programming: The State of the Art (A. Bachem, M. Grotschel and B. Korte, eds.). — Springer Verlag. — 1983. — P. 288–311.
4. *Hock W., Schittkowski K.* A Comparative Performance Evaluation of 27 Nonlinear Programming Codes // Computing. — 1983. — **30**. — P. 335.
5. *Schittkowski K.* NLQPL: A FORTRAN-Subroutine Solving Constrained Nonlinear Programming Problems // Annals of Operations Research. 1985. — **5**. — P. 485–500.
6. *Кірік О.Є.* Розв'язання нелінійної задачі оптимального газорозподілу // Наук. вісті НТУУ «КПІ». — 2000. — № 5. — С. 30–34.
7. *Кірік О.Є.* Застосування модифікованого методу лінеаризації для розв'язання нелінійних задач розподілу потоків // Системні дослідження та інформаційні технології. — 2004. — № 3. — С. 40–49.
8. *Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М.* Численные методы в экстремальных задачах. — М.: Наука, 1975. — 319 с.
9. *Пшеничный Б.Н.* Метод линеаризации. — М.: Наука, 1983. — 136 с.
10. *Sun J.,Yang X., Chen X.* Quadratic cost flow and the conjugate gradient method // Eur. J. Oper. Res. — 2005. — **164**, № 1. — P. 104–114.
11. *Оре О.* Графы и их применение. — М.: Мир, 1965. — 174 с.
12. *Кирик Е.Е., Пшеничный Б.Н.* Теория и методы расчета сетей // Обозрение прикладной и промышленной математики. — М.: Науч. изд-во «ТВП», 1995. — Вып. 1. — С. 49–69.
13. *Пшеничный Б.Н.* Выпуклый анализ и экстремальные задачи. — М.: Наука, 1980. — 320 с.
14. *Кірік О.Є.* Алгоритми лінеаризації та спряжених градієнтів для нелінійних задач розподілу потоків // Наук. вісті НТУУ «КПІ». — 2007. — № 3. — С. 67–73.

Надійшла 13.12.2007