

Голиков А.И., Евтушенко Ю.Г., Ячимович М.
Вычислительный центр Российской академии наук
Москва, Россия

НОРМАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ И РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ЗАДАЧ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ¹

1. Введение

Известно, что нахождение нормального решения задачи ЛП тесно связано с методом регуляризации (см., например, [1]–[7]) и методом квадратичной штрафной функции [8]. По-видимому, первой работой, в которой рассматривался вопрос о совпадении решения возмущенной задачи ЛП, возникающей в методе регуляризации, с решением исходной задачи была статья Х. Удзавы, опубликованная в 1958 г. (русский перевод в [9]). Исходная задача ЛП имела вид

$$\max_{x \in X} c^T x, \quad X = \{x : Ax \leq b\}, \quad (1)$$

а возмущенная задача была представлена в виде

$$\max_{x \in X} \left(c^T x - \frac{\varepsilon}{2} \|x\|^2 \right). \quad (2)$$

При условии ограниченности множества X и существовании строго внутренней точки в [9] была доказана теорема о существовании положительного числа ε_* такого, что решение $x(\varepsilon)$ задачи (2) при всяком $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_*$ совпадает с решением исходной задачи ЛП (1). Также была приведена оценка числа ε_* , существенно использовавшая предположения теоремы. В [3] условия на X были заменены условием существования решения задачи ЛП (1). В [10] и [6, 7] независимо от статьи [9] при условии существования решения задачи (1) было установлено совпадение решений возмущенной задачи (2) и исходной (1), приведены новые оценки величины ε_* . В [3, 7, 11] было показано, что двойственной к регуляризованной задаче (2) является вспомогательная задача

$$\min_{u \geq 0} \left[b^T u + \frac{1}{2\varepsilon} \|c - A^T u\|^2 \right], \quad (3)$$

возникающая при применении квадратичного штрафа к двойственной задаче ЛП

$$\min_{u \in U} b^T u, \quad U = \{u : A^T u = c, u \geq 0\}.$$

Указана связь между решениями задач (2) и (3):

$$x(\varepsilon) = \frac{c - A^T u(\varepsilon)}{\varepsilon}.$$

В разд. 2 данной статьи приводятся нетрадиционные способы задания задач ЛП, получены соответствующие необходимые и достаточные условия оптимальности, отличные от

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 03-01-00464), по программе поддержки ведущих научных школ (код проекта НШ-1737.2003.1) и программе сотрудничества между РАН и Черногогорской академией наук и искусства.

условий Куна–Таккера. В качестве основных переменных использованы переменные прямой задачи и вектор невязок ограничений двойственной задачи. Эти условия оптимальности позволяют находить нормальное решение прямой задачи и нормальный вектор невязок двойственной задачи ЛП с помощью однократной безусловной максимизации вогнутой функции с числом переменных на единицу больше, чем число переменных прямой задачи.

В разд. 3 с помощью теории двойственности задачи квадратичного программирования для нахождения нормального решения задачи ЛП сводятся к задачам безусловной максимизации гладких вогнутых функций в пространствах меньшей размерности, чем размерность вектора прямых переменных. Изучается множество решений двойственной задачи безусловной максимизации, что позволяет в следующем разделе получить оценки для параметра регуляризации.

В разд. 4 рассмотрены задачи, в которых проведена нетрадиционная регуляризация, отличная от регуляризации по А.Н. Тихонову. Указывается значение параметра регуляризации, начиная с которого решение регуляризованной задачи совпадает с решением исходной задачи ЛП. Минимальное значение этого параметра для некоторых задач ЛП может быть равно нулю или быть отрицательным. Двойственная задача к нетрадиционной регуляризованной задаче приводит к новому варианту метода квадратичных штрафных функций для решения задачи ЛП.

Методы решения задач ЛП из разд. 3 и 4 требуют знаний либо оптимального значения целевой функции, либо значения ε_* , начиная с которого методы регуляризации и квадратичного штрафа позволяют найти нормальное решение. Предлагаемый метод в разд. 2 свободен от этих требований. Нормальное решение прямой задачи ЛП и нормальный вектор оптимальных невязок двойственной задачи ЛП вычисляются по простым формулам в результате однократного решения задачи безусловной максимизации гладкой вогнутой кусочно-квадратичной функции. Число переменных в этой задаче на единицу больше числа переменных прямой задачи ЛП.

В разд. 5 для последовательности задач регуляризации систем линейных уравнений приводится последовательность двойственных задач, у которых число переменных равно числу уравнений. Показано, как по простым формулам по решениям последовательности двойственных задач строится последовательность решений задач регуляризации, сходящаяся к нормальному решению исходной системы уравнений.

2. Нахождение нормального решения задачи ЛП с помощью безусловной максимизации

Рассмотрим прямую и двойственную задачи линейного программирования (ЛП)

$$\min_{x \in X} c^\top x, \quad X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0_n\}, \quad (P)$$

$$\max_{u \in U} b^\top u, \quad U = \{u \in \mathbb{R}^m : v = c - A^\top u \geq 0_n\}. \quad (D)$$

Здесь A — матрица $m \times n$ ранга m , $m \leq n$, ее дефект $\nu = n - m$; векторы $c, v, x \in \mathbb{R}^n$; $u, b \in \mathbb{R}^m$; через 0_i обозначен нулевой i -мерный вектор. Предполагаем, что эти задачи имеют решение. Множества решений задач (P) и (D) обозначим соответственно через X_* и U_* , а оптимальные векторы через x_* и u_* .

Необходимые и достаточные условия оптимальности (условия Куна–Таккера) для задач (P) и (D) имеют вид

$$Ax - b = 0_m, \quad c - A^\top u \geq 0_n, \quad D(x)(c - A^\top u) = 0_n, \quad x \geq 0_n. \quad (4)$$

Здесь и ниже через $D(z)$ обозначена диагональная матрица, у которой i -й диагональный элемент является i -й компонентой z^i вектора z .

Помимо традиционных необходимых и достаточных условий оптимальности (4) и форм записи (P) и (D) взаимно двойственных задач ЛП будем использовать иные представления, следуя [12]. Для этого введем матрицу K размера $\nu \times n$. Считаем, что строки матрицы K линейно независимы и принадлежат нуль-пространству матрицы A , поэтому натянутое на них пространство $\text{im } K^\top$ совпадает с нуль-пространством (ядром) матрицы A . В качестве K можно использовать любую матрицу, ν строк которой образуют базис нуль-пространства матрицы A . Таким образом, $\text{im } K^\top$ является ортогональным дополнением к пространству $\text{im } A^\top$. Поэтому

$$\text{im } K^\top = \ker A, \quad AK^\top = 0_{m\nu}, \quad \mathbb{R}^n = \text{im } A^\top \oplus \text{im } K^\top. \quad (5)$$

Здесь через 0_{ij} обозначена $(i \times j)$ -матрица с нулевыми элементами, $W_1 \oplus W_2$ — прямая сумма подпространств W_1 и W_2 .

Если матрицу A представить в блочном виде $A = [B \mid N]$, где B не вырождена, то матрицу K можно записать в следующем виде: $K = [-N^\top(B^{-1})^\top \mid I_\nu]$. Здесь и ниже I_s обозначает единичную s -мерную матрицу. Если с помощью преобразований Гаусса–Жордана матрицу A привести к виду $A = [I_m \mid N]$, то матрица K представима в виде $K = [-N^\top \mid I_\nu]$.

В ряде случаев построение матрицы K упрощается. Например, пусть задача ЛП имеет ограничения типа неравенств $Nz \geq b$, где N — матрица $m \times \nu$, $z \in \mathbb{R}_+^\nu$. Вводя дополнительные переменные $\xi \in \mathbb{R}_+^m$, представим вектор $x \in \mathbb{R}^n$ как объединение векторов z , ξ , т.е. $x^\top = [z^\top, \xi^\top]$. Теперь допустимое множество можно записать в том же виде, что и в задаче (P), где матрица $A = [N \mid -I_m]$. Тогда $K = [I_\nu \mid N^\top]$.

Ниже потребуются следующие обозначения, связанные с псевдообратной матрицей. Для произвольной прямоугольной $(m \times n)$ матрицы H полного ранга определим псевдообратную $(n \times m)$ матрицу H^+ , $(m \times m)$ матрицу проектирования H^\parallel на пространство столбцов матрицы H и матрицу проектирования H^\perp на нуль-пространство матрицы H^\top . Если ранг H равен n , то $n \leq m$, столбцы матрицы H линейно независимы и

$$H^+ = (H^\top H)^{-1} H^\top, \quad H^\parallel = H H^+, \quad H^\perp = I_m - H^\parallel. \quad (6)$$

Если ранг H равен m , то $n \geq m$, строки H линейно независимы и

$$H^+ = H^\top (H H^\top)^{-1}, \quad (H^\top)^\parallel = H^+ H, \quad (H^\top)^\perp = I_n - (H^\top)^\parallel, \quad (7)$$

где $(H^\top)^\parallel$ есть $(n \times n)$ матрица проектирования на пространство столбцов матрицы H^\top , $(H^\top)^\perp$ — матрица проектирования на нуль-пространство матрицы H .

Определим вектор $d \in \mathbb{R}^\nu$ и вектор дополнительных переменных $v \in \mathbb{R}^n$ соотношениями $d = Kc$ и

$$v = c - A^\top u. \quad (8)$$

Введем в рассмотрение два аффинных множества:

$$\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}, \quad \bar{V} = \{v \in \mathbb{R}^n : Kv = d\}.$$

Всюду ниже через \bar{x} и \bar{v} обозначим произвольные фиксированные n -мерные векторы, удовлетворяющие соответственно условиям $\bar{x} \in \bar{X}$, $\bar{v} \in \bar{V}$. Вектор $\bar{v} \in \bar{V}$ находится согласно формуле (8) с помощью произвольного фиксированного вектора $\bar{u} \in \mathbb{R}^m$

$$\bar{v} = c - A^\top \bar{u}. \quad (9)$$

В простейшем варианте можно взять $\bar{u} = 0$, тогда $\bar{v} = c$. Заметим, что векторы \bar{x} , \bar{v} или некоторые их компоненты могут быть отрицательными. В силу того что матрица A имеет ранг m и $n \geq m$, всегда $\bar{X} \neq \emptyset$ и $\bar{V} \neq \emptyset$. Отметим, что формула (8) с помощью матрицы A^\top выражает общее решение неоднородной системы $Kv = d$. А общее решение неоднородной системы $Ax = b$ выражается с помощью матрицы K :

$$x = \bar{x} - K^\top y, \quad (10)$$

где \bar{x} — частное решение системы, а $K^\top y$ — общее решение однородной системы $Ax = 0_m$ и $y \in \mathbb{R}^\nu$.

Далее вместо прямой задачи (P) будем в основном иметь дело со следующей задачей:

$$f_*^1(\bar{v}) = \min_{x \in X} \bar{v}^\top x, \quad X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0_n\}. \quad (P_x)$$

Множества решений задач (P) и (P_x) совпадают, а оптимальные значения целевых функций отличаются на константу, зависящую от выбора \bar{v} и равную нулю, если $\bar{v} = c$. Более того, для любого $x \in \bar{X}$ имеем

$$c^\top x = \bar{v}^\top x + b^\top \bar{u}, \quad (11)$$

где \bar{v} определен через \bar{u} согласно (9).

Для задачи (P_x) приведем двойственную задачу

$$\max_{w \in W} b^\top w, \quad W = \{w \in \mathbb{R}^m : \bar{v} - A^\top w \geq 0_n\}. \quad (C_w)$$

Между допустимыми множествами U и W задач (D) и (C_w) существует взаимно однозначное соответствие $U = \bar{u} + W$, где \bar{u} определяет по формуле (9) вектор $\bar{v} \in \bar{V}$. Решение задачи (C_w) будем обозначать через w_* , а множество решений задачи — через W_* . Аналогичная связь $U_* = \bar{u} + W_*$ имеет место между множествами решений задач (D) и (C_w) .

Используя соотношение (10), задачу (P_x) можно записать в виде стандартной задачи ЛП с ограничениями только типа неравенств

$$\max_{y \in Y} d^\top y, \quad Y = \{y \in \mathbb{R}^\nu : \bar{x} - K^\top y \geq 0_n\}. \quad (P_y)$$

Решение задачи (P_y) обозначим через y_* . Между допустимыми множествами X и Y , множествами решений X_* и Y_* задач (P_x) и (P_y) существует взаимно однозначное соответствие. Для множеств решений X_* , Y_* это можно представить в виде

$$X_* = \bar{x} - K^\top Y_*, \quad Y_* = (K^\top)^+(\bar{x} - X_*) = (KK^\top)^{-1}K(\bar{x} - X_*). \quad (12)$$

С помощью матрицы K и переменных v двойственную задачу (D) можно записать в форме, симметричной (P_x) :

$$f_*^2(\bar{x}) = \min_{v \in V} \bar{x}^\top v, \quad V = \{v \in \mathbb{R}^n : Kv = d, v \geq 0_n\}. \quad (C_v)$$

Решение задачи (C_v) обозначим через v_* . Существует взаимно однозначное соответствие между допустимыми множествами U и V , между множествами решений U_* и V_* соответственно задач (D) и (C_v) . Задачи (P_y) и (C_v) являются взаимно двойственными, Укажем также на связь между множествами решений V_* и W_* задач (C_v) и (C_w) :

$$V_* = \bar{v} - A^\top W_*, \quad W_* = (A^\top)^+(\bar{v} - V_*). \quad (13)$$

Необходимые и достаточные условия оптимальности задач (P_x) и (C_v) могут быть представлены в виде

$$Ax = b, \quad Kv = d, \quad \bar{v}^\top x + \bar{x}^\top v = \bar{x}^\top \bar{v}, \quad x \geq 0_n, \quad v \geq 0_n. \quad (14)$$

Будем искать нормальное решение системы (14), т.е. рассмотрим следующую задачу квадратичного программирования:

$$\min_{x \in \mathbb{R}_+^n} \min_{v \in \mathbb{R}_+^n} \left[\frac{1}{2} (\|x\|^2 + \|v\|^2) : Ax = b, Kv = d, \bar{v}^\top x + \bar{x}^\top v = \bar{x}^\top \bar{v} \right]. \quad (15)$$

Для этой задачи выпишем функцию Лагранжа

$$L(x, v, p, q, \alpha) = \frac{1}{2} (\|x\|^2 + \|v\|^2) + p^\top (b - Ax) + q^\top (d - Kv) + \alpha (\bar{v}^\top x + \bar{x}^\top v - \bar{x}^\top \bar{v}), \quad (16)$$

где введены множители Лагранжа $p \in \mathbb{R}^m$, $q \in \mathbb{R}^\nu$, $\alpha \in \mathbb{R}^1$.

Необходимые и достаточные условия минимума функции Лагранжа по $x \in \mathbb{R}_+^n$ и $v \in \mathbb{R}_+^n$ имеют вид

$$\begin{aligned} L_x(x, v, p, q, \alpha) &= x - A^\top p + \alpha \bar{v} \geq 0_n, & x &\geq 0_n, & D(x)L_x &= 0_n, \\ L_v(x, v, p, q, \alpha) &= v - K^\top q + \alpha \bar{x} \geq 0_n, & v &\geq 0_n, & D(v)L_v &= 0_n. \end{aligned}$$

Разрешая эти соотношения относительно x и v , получим

$$x = (A^\top p - \alpha \bar{v})_+, \quad v = (K^\top q - \alpha \bar{x})_+. \quad (17)$$

Здесь и ниже через $(a)_+$ обозначается вектор из \mathbb{R}^n с компонентами $a_+^i = \max\{a^i, 0\}$, $i = 1, \dots, n$, где a^i есть i -я компонента вектора a .

Подставляя решения (17) в выражение для функции Лагранжа (16), получаем двойственную функцию

$$\tilde{L}(p, q, \alpha) = b^\top p + d^\top q - \alpha \bar{x}^\top \bar{v} - \frac{1}{2} [\|(A^\top p - \alpha \bar{v})_+\|^2 + \|(K^\top q - \alpha \bar{x})_+\|^2].$$

Двойственная к (15) задача является задачей безусловной максимизации и состоит в отыскании

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \max_{q \in \mathbb{R}^\nu} \max_{\alpha \in \mathbb{R}^1} \tilde{L}(p, q, \alpha). \quad (18)$$

Из теоремы двойственности, примененной к задачам (15), (18), и условий оптимальности (14) получаем следующий результат.

Теорема 1. *Задачи (P_x) , (C_v) разрешимы тогда и только тогда, когда разрешима задача безусловной максимизации (18). Для каждого решения $[p^*, q^*, \alpha^*]$ задачи (18) векторы \tilde{x}_* и \tilde{v}_* , определяемые по формулам*

$$\tilde{x}_* = (A^\top p^* - \alpha^* \bar{v})_+, \quad (19)$$

$$\tilde{v}_* = (K^\top q^* - \alpha^* \bar{x})_+, \quad (20)$$

являются решениями с минимальной евклидовой нормой соответственно задач (P) и (C_v) .

Итак, решение исходной задачи ЛП свелось к решению задачи безусловной максимизации кусочно-квадратичной функции $n + 1$ переменных. В отличие от классического метода внешнего квадратичного штрафа, примененного к задаче (P_x) , в задаче (18), отсутствует стремящийся к бесконечности коэффициент штрафа.

Далее рассмотрим следующие вопросы:

- 1) Возможность сведения задачи (18) к двум независимым задачам безусловной максимизации меньшей размерности соответственно в пространствах \mathbb{R}^{m+1} и $\mathbb{R}^{\nu+1}$.
- 2) Связь задачи (18) с регуляризованной задачей ЛП, с методом внешних квадратичных штрафных функций. Оценки оптимального значения α и пороговых значений параметра регуляризации, коэффициента штрафа.

3. Нормальные решения задач линейного программирования

Условия оптимальности (14) можно расщепить, вводя дополнительно в рассмотрение оптимальные значения целевых функций. Допустим, что известно оптимальное значение целевой функции исходной задачи (P). Тогда согласно (11) оптимальное значение целевой функции задачи (P_x) вычисляется следующим образом: $f_*^1(\bar{v}) = f_* - b^\top \bar{u}$, а оптимальное значение целевой функции задачи (C_v) находится по формуле $f_*^2(\bar{x}) = \bar{x}^\top \bar{v} - f_*^1(\bar{v})$. При этом необходимые и достаточные условия оптимальности (14) распадаются на две независимые группы условий, которые описывают множества решений соответственно задач (P_x) и C_v):

$$\begin{aligned} X_* &= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, \bar{v}^\top x = f_*^1(\bar{v}), x \geq 0_n\}, \\ V_* &= \{v \in \mathbb{R}^n : Kv = d, \bar{x}^\top v = f_*^2(\bar{x}), v \geq 0_n\}. \end{aligned}$$

Обозначим через \tilde{x} , \tilde{x}' , \tilde{x}_* , \tilde{v} , \tilde{v}' , \tilde{v}_* проекции начала координат на множества \bar{X} , X , X_* , \bar{V} , V , V_* соответственно. Векторы \tilde{x} и \tilde{v} являются нормальными решениями соответственно систем $Ax = b$ и $Kv = d$. Проекции \tilde{x}_* , \tilde{v}_* называются нормальными решениями задач (P_x) и (C_v) соответственно. Их свойствам и методам нахождения будет уделено основное внимание ниже. Так как $X_* \subseteq X \subseteq \bar{X}$, $V_* \subseteq V \subseteq \bar{V}$, то имеем неравенства

$$\|\tilde{x}\| \leq \|\tilde{x}'\| \leq \|\tilde{x}_*\|, \quad \|\tilde{v}\| \leq \|\tilde{v}'\| \leq \|\tilde{v}_*\|.$$

Наиболее просто вычисляются векторы \tilde{x} , \tilde{v} :

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= A^+b = A^\top(AA^\top)^{-1}b, \\ \tilde{v} &= K^+d = K^\top(KK^\top)^{-1}d. \end{aligned} \tag{21}$$

Наиболее сложно — векторы \tilde{x}_* , \tilde{v}_* . Трудоемкость вычисления \tilde{x}' , \tilde{v}' занимает промежуточное место. Интересны случаи, когда легко вычисляемые векторы совпадают с более трудно вычисляемыми. Например, если окажется, что $\tilde{x} \geq 0_n$, $\tilde{v} \geq 0_n$, то $\tilde{x} = x_*$, $\tilde{v} = v_*$. Если $\tilde{x} \in X$, то $\tilde{x} = \tilde{x}'$. Если $\tilde{x} \in X_*$, то $\tilde{x} = \tilde{x}' = \tilde{x}_*$.

Все задачи отыскания проекций ставятся как задачи квадратичного программирования, в которых ищется минимум функций $\|x\|^2/2$ и $\|v\|^2/2$ на соответствующих множествах. Таким образом, приходим к следующим шести задачам отыскания решений с минимальной евклидовой нормой (нормальные решения):

$$\frac{\|\tilde{x}_*\|^2}{2} = \min_{x \in X_*} \frac{\|x\|^2}{2}, \tag{P_{x_*}}$$

$$\frac{\|\tilde{v}_*\|^2}{2} = \min_{v \in V_*} \frac{\|v\|^2}{2}, \tag{D_{v_*}}$$

$$\frac{\|\tilde{x}'\|^2}{2} = \min_{x \in X} \frac{\|x\|^2}{2}, \tag{P_{\tilde{x}'}}$$

$$\frac{\|\tilde{v}'\|^2}{2} = \min_{v \in V} \frac{\|v\|^2}{2}, \quad (D_{\tilde{v}'})$$

$$\frac{\|\tilde{x}\|^2}{2} = \min_{x \in \tilde{X}} \frac{\|x\|^2}{2}, \quad (P_{\tilde{x}})$$

$$\frac{\|\tilde{v}\|^2}{2} = \min_{v \in \tilde{V}} \frac{\|v\|^2}{2}. \quad (D_{\tilde{v}})$$

Все эти задачи имеют единственные решения, причем двойственные к ним суть задачи безусловной максимизации дифференцируемых функций в пространствах меньших размерностей: $m + 1$, $\nu + 1$, m , ν , m , ν , соответственно.

Выведем двойственные задачи для (P_{x_*}) и (D_{v_*}) . Запишем функции Лагранжа для задач (P_{x_*}) и (D_{v_*}) :

$$L(x, p, \beta) = \frac{\|x\|^2}{2} + p^\top (b - Ax) + \beta (\bar{v}^\top x - f_*^1(\bar{v})), \quad (22)$$

$$L(v, q, \gamma) = \frac{\|v\|^2}{2} + q^\top (d - Kv) + \gamma (\bar{x}^\top v - f_*^2(\bar{x})). \quad (23)$$

Здесь $p \in \mathbb{R}^m$, $q \in \mathbb{R}^\nu$, $\beta \in \mathbb{R}^1$, $\gamma \in \mathbb{R}^1$ — множители Лагранжа.

Будем искать седловые точки функций Лагранжа $L(x, p, \beta)$ и $L(v, q, \gamma)$, решая, соответственно, следующие задачи:

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \max_{\beta \in \mathbb{R}^1} \min_{x \in \mathbb{R}_+^n} L(x, p, \beta), \quad (24)$$

$$\max_{q \in \mathbb{R}^\nu} \max_{\gamma \in \mathbb{R}^1} \min_{v \in \mathbb{R}_+^n} L(v, q, \gamma). \quad (25)$$

Внутренние задачи минимизации решаются аналитически, внешние задачи сводятся к решению задач безусловной максимизации вогнутой дифференцированной кусочно-квадратичной функции. Необходимые и достаточные условия минимума функций Лагранжа по $x \in \mathbb{R}_+^n$ и $v \in \mathbb{R}_+^n$ имеют вид

$$L_x(x, p, \beta) = x - A^\top p + \beta \bar{v} \geq 0_n, \quad x \geq 0_n, \quad D(x)L_x(x, p, \beta) = 0_n, \quad (26)$$

$$L_v(v, q, \gamma) = v - K^\top q + \gamma \bar{x} \geq 0_n, \quad v \geq 0_n, \quad D(v)L_v(v, q, \gamma) = 0_n. \quad (27)$$

Разрешая соотношения (26) относительно x и (27) относительно v , получаем

$$x = (A^\top p - \beta \bar{v})_+, \quad (28)$$

$$v = (K^\top q - \gamma \bar{x})_+. \quad (29)$$

Подставляя решения (28), (29) соответственно в выражения для функций Лагранжа (22), (23), получаем двойственные функции

$$\tilde{L}(p, \beta) = b^\top p - \beta f_*^1(\bar{v}) - \frac{\|(A^\top p - \beta \bar{v})_+\|^2}{2}, \quad (30)$$

$$\tilde{L}(q, \gamma) = d^\top q - \gamma f_*^2(\bar{x}) - \frac{\|(K^\top q - \gamma \bar{x})_+\|^2}{2}. \quad (31)$$

Эти функции дифференцируемы, вогнуты. Задача, двойственная к (P_{x_*}) , является задачей безусловной максимизации в $(m + 1)$ -мерном пространстве и состоит в отыскании

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \max_{\beta \in \mathbb{R}^1} \tilde{L}(p, \beta). \quad (D_p)$$

Необходимые и достаточные условия максимума задачи (D_p) имеют вид

$$\begin{aligned}\tilde{L}_p(p, \beta) &= b - A(A^\top p - \beta\bar{v})_+ = 0_m, \\ \tilde{L}_\beta(p, \beta) &= -f_*^1(\bar{v}) + \bar{v}^\top (A^\top p - \beta\bar{v})_+ = 0.\end{aligned}\quad (32)$$

Если тройка $[x, p, \beta]$ — решение задачи (24), то x — решение задачи (P_x) , а пара $[p, \beta]$ — решение задачи (D_p) . Для рассматриваемой задачи квадратичного программирования (P_{x_*}) справедливо и обратное утверждение: если пара $[p, \beta]$ — решение задачи (D_p) , то, подставляя эту пару в формулу (28), получим решение x задачи (P_{x_*}) и тройку $[x, p, \beta]$, являющуюся решением задачи (24). Аналогично, двойственной к (D_{v_*}) является задача безусловной максимизации в $(\nu + 1)$ -мерном пространстве

$$\max_{q \in \mathbb{R}^\nu} \max_{\gamma \in \mathbb{R}^1} \tilde{L}(q, \gamma). \quad (D_q)$$

Необходимые и достаточные условия максимума задачи (D_q) имеют вид

$$\begin{aligned}\tilde{L}_q(q, \gamma) &= q - K(K^\top q - \gamma\bar{x})_+ = 0_\nu, \\ \tilde{L}_\gamma(q, \gamma) &= -f_*^2(\bar{x}) + \bar{x}^\top (K^\top q - \gamma\bar{x})_+ = 0.\end{aligned}\quad (33)$$

Отметим две особенности задач квадратичного программирования (P_{x_*}) , (D_{v_*}) и двойственных к ним задач (D_p) , (D_q) соответственно.

1. Переменные прямых задач не входят в постановку двойственных.
2. Двойственные задачи являются задачами безусловной максимизации вогнутых кусочно-квадратичных функций в пространствах размерности $m + 1$ и $\nu + 1$.

Поэтому вместо решения задач на условный экстремум (P_{x_*}) или (D_{v_*}) целесообразно решать задачи на безусловной экстремум (D_p) или (D_q) , имеющие меньшие размерности. Тогда решения исходных задач находятся по простым формулам (28) или (29) соответственно.

Без ограничения общности можно считать, что первые ℓ компонент нормального решения \tilde{x}_* задачи (P_x) и последние r компонент нормального решения \tilde{v}_* задачи (C_v) строго больше нуля. В соответствии с этим предположением представим векторы \tilde{x}_* , \bar{x} , \tilde{v}_* , \bar{v} и матрицы A , K в виде

$$\begin{aligned}\tilde{x}_*^\top &= [[\tilde{x}_*^\ell]^\top, [\tilde{x}_*^s]^\top, [\tilde{x}_*^r]^\top], & \bar{x}^\top &= [[\bar{x}^\ell]^\top, [\bar{x}^s]^\top, [\bar{x}^r]^\top], \\ \tilde{v}_*^\top &= [[\tilde{v}_*^\ell]^\top, [\tilde{v}_*^s]^\top, [\tilde{v}_*^r]^\top], & \bar{v}^\top &= [[\bar{v}^\ell]^\top, [\bar{v}^s]^\top, [\bar{v}^r]^\top], \\ A &= [A_\ell \mid A_s \mid A_r], & K &= [K_\ell \mid K_s \mid K_r],\end{aligned}\quad (34)$$

где $\tilde{x}_*^\ell > 0_\ell$, $\tilde{x}_*^s = 0_s$, $\tilde{x}_*^r = 0_r$, $\tilde{v}_*^\ell = 0_\ell$, $\tilde{v}_*^s = 0_s$, $\tilde{v}_*^r > 0_r$, $\ell, s, m \geq 0$ и $\ell + s + r = n$.

С учетом эквивалентности (26) и (28) и разбиения вектора \tilde{x}_* необходимые и достаточные условия оптимальности (условия Куна–Таккера) задачи (P_{x_*}) можно переписать в развернутом виде:

$$\tilde{x}_*^\ell = A_\ell^\top p - \beta\bar{v}^\ell > 0_\ell, \quad (35)$$

$$\tilde{x}_*^s = 0_s, \quad A_s^\top p - \beta\bar{v}^s \leq 0_s, \quad (36)$$

$$\tilde{x}_*^r = 0_r, \quad A_r^\top p - \beta\bar{v}^r \leq 0_r, \quad (37)$$

$$A_\ell \tilde{x}_*^\ell = b, \quad (\bar{v}^\ell)^\top \tilde{x}_*^\ell = f_*^1(\bar{v}). \quad (38)$$

Вектор \tilde{v}_* является нормальным решением задачи (C_v) и, согласно формуле (13), однозначно определяет решение w_* задачи (C_w) . С учетом введенных разбиений векторов \tilde{x}_* и \tilde{v}_* запишем развернутые условия Куна–Таккера для (P_x) и (C_w) в точке $[\tilde{x}_*, \tilde{v}_*, w_*]$:

$$\tilde{x}_*^\ell > 0_\ell, \quad \tilde{v}_*^\ell = \bar{v}^\ell - A_\ell^\top w_* = 0_\ell, \quad (39)$$

$$\tilde{x}_*^s = 0_s, \quad \tilde{v}_*^s = \bar{v}^s - A_s^\top w_* = 0_s, \quad (40)$$

$$\tilde{x}_*^r = 0_r, \quad \tilde{v}_*^r = \bar{v}^r - A_r^\top w_* > 0_r, \quad (41)$$

$$A_\ell \tilde{x}_*^\ell = b. \quad (42)$$

Аналогично записываются развернутые условия Куна–Таккера для задачи (D_{v_*}) :

$$\tilde{v}_*^\ell = 0_\ell, \quad K_\ell^\top q - \gamma \bar{x}^\ell \leq 0_\ell, \quad (43)$$

$$\tilde{v}_*^s = 0_s, \quad K_s^\top q - \gamma \bar{x}^s \leq 0_s, \quad (44)$$

$$\tilde{v}_*^r = K_r^\top q - \gamma \bar{x}^r > 0_r, \quad (45)$$

$$K_r \tilde{v}_*^r = d, \quad (\bar{x}^r)^\top \tilde{v}_*^r = f_*^2(\bar{x}), \quad (46)$$

а также развернутые условия Куна–Таккера для (C_v) и (P_y) :

$$\tilde{v}_*^\ell = 0_\ell, \quad \tilde{x}_*^\ell = \bar{x}^\ell - K_\ell^\top y_* > 0_\ell, \quad (47)$$

$$\tilde{v}_*^s = 0_s, \quad \tilde{x}_*^s = \bar{x}^s - K_s^\top y_* = 0_s, \quad (48)$$

$$\tilde{v}_*^r > 0_r, \quad \tilde{x}_*^r = \bar{x}^r - K_r^\top y_* = 0_r, \quad (49)$$

$$K_r \tilde{v}_*^r = d, \quad (50)$$

вычисленные в точке $[\tilde{v}_*, \tilde{x}_*, y_*]$, где y_* определяется по \tilde{x}_* согласно формуле (12).

Нормальное решение \tilde{x}_* прямой задачи (P_x) назовем *невырожденным*, если оно содержит не менее чем m ненулевых компонент. Аналогично нормальное решение \tilde{v}_* двойственной задачи (C_v) назовем *невырожденным*, если оно содержит не менее чем ν ненулевых компонент.

В принятых выше обозначениях нормальные решения \tilde{x}_* и \tilde{v}_* не вырождены, если $\ell \geq m$ и $r \geq \nu$. Заметим, что случай одновременного выполнения неравенств $\ell > m$ и $r > \nu$ невозможен. Так, если $m < \ell$, то из неравенства $\ell + r \leq n$ имеем $m + r < n$ и, следовательно, $r < \nu$. Если $\nu < r$, то $\ell + r \leq n < r + m$ и, следовательно, $\ell < m$.

Далее будем использовать формулы для псевдообратных матриц и матриц проектирования вида (6)–(7) с заменой матриц A и K на “урезанные” $(m \times \ell)$ матрицу $A_\ell A_\ell$ и $(\nu \times r)$ матрицу K_r .

Теорема 2. Пусть множества X_* и V_* не пусты. Тогда решения задач (P_{x_*}) , (D_{v_*}) существуют и единственны, и если столбцы матрицы A , соответствующие ненулевым компонентам вектора \tilde{x}_* , образуют матрицу A_ℓ максимального ранга, то компоненты решения \tilde{x}_* представимы в виде

$$\tilde{x}_*^\ell = A_\ell^+ b, \quad \tilde{x}_*^s = 0_s, \quad \tilde{x}_*^r = 0_r. \quad (51)$$

Если столбцы матрицы K , соответствующие ненулевым компонентам вектора \tilde{v}_* , образуют матрицу K_r максимального ранга, то компоненты решения \tilde{v}_* представимы в виде

$$\tilde{v}_*^\ell = 0_\ell, \quad \tilde{v}_*^s = 0_s, \quad \tilde{v}_*^r = K_r^+ d. \quad (52)$$

Доказательство. В задачах квадратичного программирования (P_{x_*}) и (D_{v_*}) целевые функции строго выпуклы, множества X_* и V_* не пусты. Поэтому обе задачи имеют единственные решения \tilde{x}_* и \tilde{v}_* и существуют такие множители Лагранжа p , β и q , γ , что выполнены условия оптимальности (26), (32) и (27), (33), а также соответствующие условия Куна–Таккера (35)–(38) и (43)–(46).

С учетом разбиения (34) условия $\tilde{x}_* \in X$, $\tilde{v}_* \in V$ можно записать в виде

$$A_\ell \tilde{x}_*^\ell = b, \quad K_r \tilde{v}_*^r = d. \quad (53)$$

Если $\ell \leq m$, то по условию теоремы ранг матрицы A_ℓ равен ℓ . Тогда первое уравнение в (53) имеет единственное решение \tilde{x}_*^ℓ , задаваемое формулой в (51), где $A_\ell^+ = (A_\ell^\top A_\ell)^{-1} A_\ell^\top$ согласно (6). В этом случае вектор b принадлежит пространству столбцов матрицы A_ℓ , и поэтому его проекция на это пространство есть $A_\ell^+ b = A_\ell A_\ell^+ b = b$, вектор \tilde{x}_* является вершиной многогранного допустимого множества. Аналогично, если $\nu \geq r$, то единственное решение \tilde{v}_*^r второго уравнения в (53) задается формулой в (52), где $K_r^+ = (K_r^\top K_r)^{-1} K_r^\top$.

Рассмотрим теперь случай невырожденного решения \tilde{x}_* , когда $\ell \geq m$. По условию теоремы ранг A_ℓ равен m . Тогда системы уравнений (35) и (39) имеют единственные решения, которые с учетом (38) представим в виде

$$p = (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b + \beta (A_\ell^\top)^+ \bar{v}^\ell, \quad w_* = (A_\ell^\top)^+ \bar{v}^\ell, \quad (54)$$

где $(A_\ell^\top)^+ = (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} A_\ell$. Подставляя в (35) найденное решение для вектора p , получим

$$\begin{aligned} \tilde{x}_*^\ell &= A_\ell^\top (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b + \beta (A_\ell^\top)^\parallel \bar{v}^\ell - \beta \bar{v}^\ell = \\ &= A_\ell^\top (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b - \beta (A_\ell^\top)^\perp \bar{v}^\ell = A_\ell^\top (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b. \end{aligned} \quad (55)$$

Здесь использовано свойство $(A_\ell^\top)^\perp \bar{v}^\ell = 0_m$, которое следует из формулы (39), показывающей, что вектор \bar{v}^ℓ лежит в пространстве столбцов матрицы A_ℓ^\top . Таким образом, приходим к первой формуле (51), в которой $A_\ell^+ = A_\ell^\top (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b$.

Аналогично доказывается последняя формула в (52) в случае, когда $r \geq \nu$. При этом используются развернутые условия Куна–Таккера (43)–(46) для задачи (D_{v_*}) и развернутые условия Куна–Таккера (47)–(50) для (C_v) и (P_y) . Аналогом формул (54) и (55) являются следующие:

$$\begin{aligned} q &= (K_r K_r^\top)^{-1} d + \gamma y_*, \quad y_* = (K_r^\top)^+ \bar{x}^r, \\ \tilde{v}_*^r &= K_r^\top (K_r K_r^\top)^{-1} d + \gamma K_r^\top (K_r^\top)^+ \bar{x}^r - \gamma \bar{x}^r = K_r^+ d. \end{aligned}$$

Здесь $(K_r^\top)^+ = (K_r K_r^\top)^{-1} K_r$ и $K_r^+ = K_r^\top (K_r K_r^\top)^{-1}$. Теорема доказана. \square

Доказанная теорема утверждает, что при достаточно естественных предположениях ненулевые компоненты решений задач (P_{x_*}) , (D_{v_*}) совпадают с нормальным решением соответствующих систем уравнений (53).

Заметим, что, в отличие от задачи (P_{x_*}) , двойственная к ней задача (D_p) имеет неединственное решение. Естественно возникает вопрос о нахождении среди всех решений задачи (D_p) минимального значения β_* множителя Лагранжа β . Тогда в двойственной задаче (D_p) можно зафиксировать $\beta \geq \beta_*$ и решать задачу максимизации двойственной функции $\tilde{L}(p, \beta)$ только по переменным p . При этом пара $[p, \beta]$ является решением задачи (D_p) , тройка $[\tilde{x}_*, p, \beta]$ — решением задачи (24), и нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) определится по формуле (28).

Для нахождения минимального β обратимся к условиям Куна–Таккера для задачи (P_{x_*}) . Среди решений системы (35)–(38) найдем такие множители Лагранжа $[p, \beta]$, что β является минимальным, т.е. приходим к задаче линейного программирования

$$\beta_* = \inf_{\beta \in \mathbb{R}^1} \inf_{p \in \mathbb{R}^m} \{\beta : A_\ell^\top p - \beta \bar{v}^\ell = \tilde{x}_*^\ell, A_s^\top p - \beta \bar{v}^s \leq 0_s, A_r^\top p - \beta \bar{v}^r \leq 0_r\}. \quad (56)$$

Целевая функция в этой задаче может быть не ограничена снизу. В этом случае $\beta_* = -\infty$. Это означает, что для любого фиксированного значения β существует решение p задачи $\max_{p \in \mathbb{R}^m} \tilde{L}(p, \beta)$ и тройка $[\tilde{x}_*, p, \beta]$ есть решение задачи (24).

Аналогичная ситуация и в задаче (D_q) , которая, в отличие от задачи (D_{v_*}) , имеет неединственное решение. Так же возникает вопрос о нахождении минимального значения γ_* множителя Лагранжа γ . Тогда, зафиксировав $\gamma \geq \gamma_*$, можно решать задачу максимизации двойственной функции $\tilde{L}(q, \gamma)$ только по переменным q . Минимальный множитель Лагранжа γ находится из условий Куна–Таккера (43)–(46) для задачи (D_{v_*}) . То есть требуется найти такую пару $[q, \gamma]$, что множитель γ является минимальным:

$$\gamma_* = \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^1} \inf_{q \in \mathbb{R}^\nu} \{\gamma : K_\ell^\top q - \gamma \bar{x}^\ell \leq 0_\ell, K_s^\top q - \gamma \bar{x}^s \leq 0_s, K_r^\top q - \gamma \bar{x}^r = \tilde{v}_*^r\}. \quad (57)$$

Для этой задачи так же возможен случай $\gamma_* = -\infty$. Тогда в задаче (D_q) можно зафиксировать любое значение γ .

Из приведенных результатов и теоремы 1 из [6] вытекает следующая

Теорема 3. Пусть задача (P_x) разрешима. Тогда существуют такие β_* и γ_* , определяемые в (56) и (57), что имеют место следующие утверждения:

1) при любом фиксированном $\beta \geq \beta_*$ пара $[p, \beta]$, где p — решение задачи

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \tilde{L}(p, \beta), \quad (58)$$

определяет нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) по формуле

$$\tilde{x}_* = (A^\top p - \beta \bar{v})_+;$$

2) при любом фиксированном $\gamma \geq \gamma_*$ пара $[q, \gamma]$, где q — решение задачи

$$\max_{q \in \mathbb{R}^\nu} \tilde{L}(q, \gamma), \quad (59)$$

определяет нормальное решение \tilde{v}_* задачи (C_v) по формуле

$$\tilde{v}_* = (K^\top q - \gamma \bar{x})_+.$$

Определим значение β_* по формуле

$$\beta_* = \begin{cases} \max_{\ell+s+1 \leq i \leq n} \frac{[A_r^\top (A_\ell^\top)^+ \tilde{x}_*^\ell]^i}{[\tilde{v}_*^r]^i}; \\ -\infty, \end{cases} \quad \text{если } \|\tilde{v}_*\| = 0. \quad (60)$$

Теорема 4. Пусть нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) не вырождено и ранг матрицы A_ℓ равен m . Тогда тройка $[x, p, \beta]$, где

$$x = \tilde{x}_*, \quad p = (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b + \beta w_*, \quad \beta \geq \beta_*, \quad (61)$$

является седловой точкой функции Лагранжа $L(x, p, \beta)$ для задачи (P_{x_*}) , при этом пара $[p, \beta]$ является решением двойственной задачи (D_p) и выполнены неравенства

$$A_s^\top (A_\ell^\top)^+ \tilde{x}_*^\ell \leq 0_s, \quad (62)$$

$$A_r^\top (A_\ell^\top)^+ \tilde{x}_*^\ell \leq \beta \tilde{v}_*^r. \quad (63)$$

Доказательство. Из (39)–(41) определим \bar{v}^ℓ , \bar{v}^s , \bar{v}^r , подставим соответственно в соотношения (35)–(37). В результате получим

$$\tilde{x}_*^\ell = A_\ell^\top (p - \beta w_*), \quad (64)$$

$$A_s^\top (p - \beta w_*) \leq 0_s, \quad (65)$$

$$A_r^\top (p - \beta w_*) \leq 0_r. \quad (66)$$

Из (64) однозначно определяется вектор p , который с учетом условия $A_\ell \tilde{x}_*^\ell = b$ представим в виде

$$p = (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b + \beta w_*. \quad (67)$$

Подставляя это выражение для p в (65) и (66), приходим к неравенствам (62) и (63). Итак, условия Куна–Таккера (35)–(38) для задачи (P_{x_*}) сводятся к (62), (63), (38), где $\tilde{x}_*^\ell > 0_\ell$, $\tilde{x}_*^s = 0_s$, $\tilde{x}_*^r = 0_r$, а множители Лагранжа p выражаются формулой (67) и линейно зависят от β . Из (63) следует, что при любом $\beta \geq \beta_*$, где β_* задается формулой (60), тройка $[x, p, \beta]$, определяемая в (61), удовлетворяет условиям Куна–Таккера для задачи (P_{x_*}) и, следовательно, является седловой точкой функции Лагранжа для задачи (P_{x_*}) . Тогда пара $[p, \beta]$ является решением двойственной задачи (D_p) к задаче (P_{x_*}) . Теорема доказана. \square

Из доказательства теоремы 4 следует, что задача (56) нахождения β_* может быть решена явно, если $\ell \geq t$ и ранг матрицы A_ℓ равен t . При выполнении условий теоремы 4 оптимальное значение целевой функции выражается формулой (60), а оптимальный вектор p определяется формулой из (61).

Значение γ_* определим следующей формулой:

$$\gamma_* = \begin{cases} \max_{1 \leq i \leq \ell} \frac{[K_\ell^\top (K_r^\top)^+ \tilde{v}_*^r]^i}{[\tilde{x}_*^\ell]^i}; \\ -\infty, \end{cases} \quad \text{если } \|\tilde{x}_*\| = 0. \quad (68)$$

Аналогом теоремы 4 в случае задачи (D_q) будет следующая

Теорема 5. Пусть нормальное решение \tilde{v}_* задачи (C_v) не вырождено и ранг матрицы K_r равен ν . Тогда тройка $[v, q, \gamma]$, где

$$v = \tilde{v}_*, \quad q = (K_r K_r^\top)^{-1} d + \gamma u_*, \quad \gamma \geq \gamma_*, \quad (69)$$

является седловой точкой функции Лагранжа $L(v, q, \gamma)$ для задачи (D_{v_*}) , при этом пара $[q, \gamma]$ является решением двойственной задачи (D_q) и выполнены неравенства

$$K_\ell^\top (K_r^\top)^+ \tilde{v}_*^r \leq \gamma \tilde{x}_*^\ell, \quad K_s^\top (K_r^\top)^+ \tilde{v}_*^r \leq 0_s.$$

Доказательство совершенно аналогично доказательству теоремы 4 и основано на использовании развернутых условий Куна–Таккера (43)–(46) для задачи (D_{v_*}) и условий (47)–(50) для задач (C_v) и (P_y) .

При выполнении условий теоремы 5 задача (57) нахождения γ_* может быть явно решена. При этом γ_* определяется формулой (68), а оптимальный вектор q находится из (69).

В простейшем случае, когда A_ℓ и K_r — квадратные невырожденные матрицы, $\ell = m$, $s = 0$, $r = \nu$, нормальные решения \tilde{x}_* и \tilde{v}_* являются невырожденными базисными решениями. Формулы (60) и (68) при этом упрощаются:

$$\begin{aligned}\beta_* &= \max_{m+1 \leq i \leq n} \frac{[A_r^\top (A_\ell^\top)^{-1} \tilde{x}_*^\ell]^i}{[\tilde{v}_*^r]^i} \\ \gamma_* &= \max_{1 \leq i \leq m} \frac{[K_\ell^\top (K_r^\top)^{-1} \tilde{v}_*^r]^i}{[\tilde{x}_*^\ell]^i}.\end{aligned}\tag{70}$$

4. Регуляризованные задачи линейного программирования

Для задач линейного программирования (P_x) и (C_v) введем регуляризованные задачи

$$\min_{x \in X} \left[\beta \bar{v}^\top x + \frac{\|x\|^2}{2} \right], \quad X = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b, x \geq 0_n\}, \quad (P_x(\beta))$$

$$\min_{v \in V} \left[\gamma \bar{x}^\top v + \frac{\|v\|^2}{2} \right], \quad V = \{v \in \mathbb{R}^n : Kv = d, v \geq 0_n\}. \quad (D_v(\gamma))$$

Здесь $\beta, \gamma \in \mathbb{R}^1$ — некоторые параметры. В отличие от регуляризации по А.Н. Тихонову (см., например, [2, 4, 5]) здесь параметры регуляризации β и γ умножаются на целевые функции, и в ряде случаев они могут принимать нулевые или отрицательные значения.

Задачи ($P_x(\beta)$), ($D_v(\gamma)$) можно представить, соответственно, в виде

$$\min_{x \in X} \frac{1}{2} [\|x + \beta \bar{v}\|^2 - \beta^2 \|\bar{v}\|^2], \quad \min_{v \in V} \frac{1}{2} [\|v + \gamma \bar{x}\|^2 - \gamma^2 \|\bar{x}\|^2],$$

т.е. в виде задач проектирования векторов $-\beta \bar{v}$ и $-\gamma \bar{x}$ на множества соответственно X и V .

Выведем двойственную задачу к ($P_x(\beta)$). Для этого выпишем функцию Лагранжа задачи ($P_x(\beta)$)

$$L(x, p) = \beta \bar{v}^\top x + \frac{\|x\|^2}{2} + p^\top (b - Ax), \tag{71}$$

где $p \in \mathbb{R}^m$ — множители Лагранжа.

Отметим, что функция Лагранжа $L(x, p)$ отличается от определенной в (22) для задачи (P_{x_*}) функции Лагранжа $L(x, p, \beta)$ на величину $-\beta f_*^1(\bar{v})$, являющуюся константой при фиксированном β . Необходимые и достаточные условия минимума по $x \in \mathbb{R}_+^n$ функции Лагранжа $L(x, p)$ имеют вид, полностью совпадающий с (26). Следовательно, и формула для определения точки минимума совпадает с (28). Подставляя ее в функцию Лагранжа (71), получим двойственную функцию

$$\tilde{L}(p) = b^\top p - \frac{\|(A^\top p - \beta \bar{v})_+\|^2}{2}. \tag{72}$$

Эта функция дифференцируема, вогнута по p . Двойственная к ($P_x(\beta)$) задача является задачей безусловной максимизации и состоит в отыскании

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \tilde{L}(p). \tag{D_p(\beta)}$$

Необходимые и достаточные условия максимума в этой задаче имеют вид

$$\tilde{L}_p(p) = b - A(A^\top p - \beta \bar{v})_+ = 0_m.$$

Аналогично выводится двойственная к $(D_v(\gamma))$ задача, являющаяся задачей безусловной максимизации в ν -мерном пространстве:

$$\max_{q \in \mathbb{R}^\nu} \tilde{L}(q), \quad (D_q(\gamma))$$

где двойственная функция $\tilde{L}(q)$ содержит параметр γ и имеет вид

$$\tilde{L}(q) = d^\top q - \frac{\|(K^\top q - \gamma \bar{x})_+\|^2}{2}.$$

Сравнивая $\tilde{L}(p)$ в (72) с $\tilde{L}(p, \beta)$ в (30), замечаем, что задачи $(D_p(\beta))$ и (D_p) отличаются на величину $-\beta f_*^1(\bar{v})$. Следовательно, при фиксированном β решения задач $(D_p(\beta))$ и (58) совпадают. Аналогичный факт справедлив и для задач $(D_q(\gamma))$ и (59): их решения при фиксированных γ совпадают. Поэтому следующая важная теорема является простой переформулировкой теоремы 3.

Теорема 6. Пусть задача (P_x) разрешима. Тогда существуют такие β_* и γ_* , определяемые в (56) и (57), что имеют место следующие утверждения:

1) при любом фиксированном $\beta \geq \beta_*$ решение $p(\beta)$ задачи $(D_p(\beta))$ определяет нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) по формуле

$$\tilde{x}_* = [A^\top p(\beta) - \beta \bar{v}]_+; \quad (73)$$

2) при любом фиксированном $\gamma \geq \gamma_*$ решение $q(\gamma)$ задачи $(D_q(\gamma))$ определяет нормальное решение \tilde{v}_* задачи (C_v) по формуле

$$\tilde{v}_* = [K^\top q(\gamma) - \gamma \bar{x}]_+. \quad (74)$$

Если нормальное решение \tilde{x}_* не вырождено и ранг матрицы A_ℓ равен m , или если нормальное решение \tilde{v}_* не вырождено и ранг матрицы K_r равен ν , то формулировку теоремы 6 можно уточнить аналогично тому, как это было сделано в теоремах 4 и 5. Простым следствием теоремы 4 является следующая

Теорема 7. Пусть выполнены условия теоремы 4. Тогда при любом фиксированном $\beta \geq \beta_*$, где β_* находится по формуле (60), решение $p(\beta)$ задачи $(D_p(\beta))$ определяет нормальные решения задач (P_x) и (C_v) соответственно по формулам (73) и $\tilde{v}_* = \bar{v} - A^\top w_*$, где

$$w_* = \frac{p(\beta) - (A_\ell A_\ell^\top)^{-1} b}{\beta}.$$

Следствием теоремы 5 является

Теорема 8. Пусть выполнены условия теоремы 5. Тогда при любом фиксированном $\gamma \geq \gamma_*$, где γ_* находится по формуле (68), решение $q(\gamma)$ задачи $(D_q(\gamma))$ определяет нормальные решения задач (C_v) и (P_x) соответственно по формулам (74) и $\tilde{x}_* = \bar{x} - K^\top y_*$, где

$$y_* = \frac{q(\gamma) - (K_r K_r^\top)^{-1} d}{\gamma}.$$

Обозначим через $\text{pr}(z, Z)$ проекцию вектора z на множество Z . Из теорем 6–8 следует, что для любых $\beta \geq \beta_*$, $\gamma \geq \gamma_*$ справедливы равенства

$$\begin{aligned}\tilde{x}_* &= \text{pr}(-\beta\bar{v}, X) = [A^\top p(\beta) - \beta\bar{v}]_+ = \text{pr}(0_n, X_*), \\ \tilde{v}_* &= \text{pr}(-\gamma\bar{x}, V) = [K^\top q(\gamma) - \gamma\bar{x}]_+ = \text{pr}(0_n, V_*).\end{aligned}$$

Из этих формул сделаем следующее заключение: при $\beta \geq \beta_*$, $\gamma \geq \gamma_*$ нормальные решения задач ЛП (P_x) и (C_v) совпадают с решениями регуляризованных задач $(P_x(\beta))$ и $(D_v(\gamma))$ и совпадают с проекциями начала координат на множества решений X_* , V_* и проекциями $-\beta\bar{v}$ и $-\gamma\bar{x}$ на X и V соответственно. Все эти задачи суть задачи квадратичного программирования, двойственные к задачам безусловной максимизации в различных пространствах. Между множествами решений этих задач существует связь, выражаемая простыми формулами. Отметим, что двойственная к (P_{x_*}) задача безусловной максимизации (D_p) имеет на единицу ббольшую размерность, чем двойственная задача $(D_p(\beta))$. Неизвестный параметр β в $(D_p(\beta))$ является переменной (множителем Лагранжа) в задаче (D_p) .

Рассмотрим важный частный случай задачи (P_x) , для которого $\beta_* \leq 0$. Согласно формуле (60) этот случай имеет место, если выполнены условия теоремы 4, т.е. нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) не вырождено и ранг матрицы A_ℓ равен m , и если $\|\tilde{v}_*\| = 0$ или $A_r^\top (A_\ell^\top)^+ \tilde{x}_*^\ell \leq 0_r$. Положим $\beta = 0$; тогда регуляризованная задача $(P_x(\beta))$ превращается в задачу нахождения наименьшего по норме вектора \tilde{x}_* из допустимого множества X . Согласно теореме 7 этот вектор одновременно является решением задачи $(P_x(\beta))$ при любом $\beta \geq \beta_*$ и нормальным решением задач (P_x) , (P) , а также решением задачи (P_{x_*}) .

Рассмотрим случай, когда $\beta \geq \beta_*$ и $\beta > 0$. В задаче $(D_p(\beta))$ сделаем замену переменных, положив $w = p/\beta$. Тогда

$$\tilde{L}(p) = \beta \left[b^\top w - \frac{\beta}{2} \|(A^\top w - \bar{v})_+\|^2 \right],$$

и задача $(D_p(\beta))$ заменяется эквивалентной задачей

$$\max_{w \in \mathbb{R}^m} \left[b^\top w - \frac{\beta}{2} \|A^\top w - \bar{v}\|_+^2 \right], \quad (75)$$

т.е. приходим к методу внешнего квадратичного штрафа, примененному к задаче (C_w) . В этом случае из теоремы 6 следует, что вектор $w(\beta)$, полученный в результате максимизации дифференцируемой внешней штрафной функции, определяет по формуле $\tilde{x}_* = \beta[A^\top w(\beta) - \bar{v}]_+$ нормальное решение задачи (P_x) при $\beta > \beta_*$. Из хорошо известных свойств метода внешнего квадратичного штрафа [8] имеем $w(\beta) = p(\beta)/\beta \rightarrow w_*$ при $\beta \rightarrow +\infty$.

Таким образом, полученные выше соотношения для β_* дают оценки коэффициента штрафа для классического метода внешнего квадратичного штрафа, примененного к задаче (C_w) , т.е. к задаче ЛП с ограничениями типа неравенств. Если $\beta_* \leq 0$, то при любом положительном β , и если $\beta_* > 0$, то при любом $\beta \geq \beta_*$ с помощью решения $w(\beta)$ задачи (75) получаем нормальное решение \tilde{x}_* задачи (P_x) .

Итак, задачу $(D_p(\beta))$ можно рассматривать как нестандартную реализацию метода внешнего квадратичного штрафа для решения задачи линейного программирования (C_w) . Заметим, что задача (75) является двойственной к задаче регуляризации

$$\min_{x \in X} \left[\bar{v}^\top x + \frac{1}{2\beta} \|x\|^2 \right].$$

Полагая $\varepsilon_* = 1/\beta_*$, если $\beta_* > 0$, и $\varepsilon_* = +\infty$, если $\beta_* \leq 0$, где β_* определяется приведенными выше соотношениями, получаем оценку для параметра регуляризации в классической задаче регуляризации

$$\min_{x \in X} \left[\tilde{v}^\top x + \frac{\varepsilon}{2} \|x\|^2 \right]. \quad (76)$$

При $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_*$ решения задач (76) и (P_x) совпадают.

Еще раз вернемся к задаче безусловной минимизации (18) для одновременного нахождения нормальных решений задач ЛП (P_x) и (C_v) . Если в функции $\tilde{L}(p, q, \alpha)$ зафиксировать скаляр α и вместо задачи (18) рассмотреть упрощенную задачу

$$\max_{p \in \mathbb{R}^m} \max_{q \in \mathbb{R}^{\nu}} \tilde{L}(p, q, \alpha), \quad (77)$$

то последняя распадается на две независимые задачи $(D_p(\beta))$ и $(D_q(\gamma))$, в которых $\beta = \gamma = \alpha$. Тогда из теоремы 6 следует

Теорема 9. Пусть задача (P_x) разрешима. Тогда существует такой скаляр $\alpha^* = \max\{\beta_*, \gamma_*\}$, где β_* и γ_* определяются из (56) и (57), что при любом фиксированном $\alpha \geq \alpha^*$ решение $[p(\alpha), q(\alpha)]$ задачи (77) определяет нормальные решения задач (P_x) и (C_v) соответственно по формулам

$$\tilde{x}_* = [A^\top p(\alpha) - \alpha \tilde{v}]_+, \quad \tilde{v}_* = [K^\top q(\alpha) - \alpha \tilde{x}]_+.$$

5. Нормальные решения систем линейных уравнений и регуляризация

Рассмотрим совместную систему линейных уравнений

$$Ax = b. \quad (78)$$

Здесь A — $(m \times n)$ ненулевая матрица, вектор $b \in \mathbb{R}^m$, $\|b\| \neq 0$. В методе регуляризации рассматривается последовательность задач безусловной минимизации

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} (\|b - Ax\|^2 + \varepsilon \|x\|^2) \quad (79)$$

с положительным параметром ε , стремящимся к нулю. Единственное решение $x(\varepsilon)$ задачи (79) при фиксированном ε выражается явно следующей формулой:

$$x(\varepsilon) = (\varepsilon I_n + A^\top A)^{-1} A^\top b. \quad (80)$$

Здесь и ниже через I_k обозначена единичная матрица порядка k . При $\varepsilon \rightarrow 0$ решение $x(\varepsilon)$ сходится к нормальному решению системы (78) [13]. В (80) обратная матрица существует при любом ранге матрицы A и любом $\varepsilon > 0$.

Выражение (80) для вычисления $x(\varepsilon)$ можно представить в другом виде, используя формулу Шермана–Моррисона–Вудбери [14]:

$$x(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} [I_n - A^\top (\varepsilon I_m + AA^\top)^{-1} A] A^\top b. \quad (81)$$

Отметим, что в этой формуле требуется обращать матрицу порядка m в отличие от формулы (80), в которой обращается матрица порядка n . Ниже будет выведена еще одна формула вычисления $x(\varepsilon)$, в которой требуется обращать матрицу порядка m , но с меньшим числом перемножений матриц, чем в формуле (80).

При фиксированном параметре ε задачу (79) можно рассматривать как метод наименьших квадратов (метод минимизации невязок), примененный к следующей несовместной системе:

$$Ax = b, \quad -\sqrt{\varepsilon}x = 0_n. \quad (82)$$

Вектор $x(\varepsilon)$ — решение задачи безусловной минимизации (79) — является псевдорешением системы (82). Через $z_1(\varepsilon) = b - Ax(\varepsilon)$ и $z_2(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon}x(\varepsilon)$ обозначим составляющие вектора минимальных невязок

$$z^\top(\varepsilon) = [z_1^\top(\varepsilon), z_2^\top(\varepsilon)]$$

системы (82).

Согласно теореме об альтернативах (см., например [15, 16]) для несовместной системы (82) можно построить совместную альтернативную систему вида

$$A^\top u_1 - \sqrt{\varepsilon}u_2 = 0_n, \quad b^\top u_1 = \rho > 0. \quad (83)$$

Здесь ρ — фиксированная положительная константа, векторы неизвестных $u_1 \in \mathbb{R}^m$, $u_2 \in \mathbb{R}^n$. Согласно [16] нормальный вектор $\tilde{u}(\varepsilon)^\top = [\tilde{u}_1^\top(\varepsilon), \tilde{u}_2^\top(\varepsilon)]$ альтернативной системы (83) выражается через вектор минимальных невязок $z(\varepsilon)$ по формулам

$$\tilde{u}_1(\varepsilon) = \frac{\rho z_1(\varepsilon)}{\|z(\varepsilon)\|^2}, \quad \tilde{u}_2(\varepsilon) = \frac{\rho z_2(\varepsilon)}{\|z(\varepsilon)\|^2}. \quad (84)$$

Формально задача безусловной минимизации (79) не имеет функцию Лагранжа, и, следовательно, для нее нельзя непосредственно построить двойственную задачу. Тем не менее, с помощью дополнительных переменных можно ввести искусственные ограничения и получить эквивалентную задачу нелинейного программирования, для которой уже стандартным образом определяется двойственная задача. Следуя [11] и [16], воспользуемся этим приемом для получения задачи, двойственной к (79). Пусть вектор переменных $z \in \mathbb{R}^{m+n}$ имеет разбиение $z^\top = [z_1^\top, z_2^\top]$, где $z_1 \in \mathbb{R}^m$, $z_2 \in \mathbb{R}^n$. Тогда двойственная к (79) задача имеет вид

$$\max_{z \in Z} \left(b^\top z_1 - \frac{1}{2} \|z\|^2 \right), \quad Z = \{z \in \mathbb{R}^{m+n} : A^\top z_1 - \sqrt{\varepsilon}z_2 = 0_n\}. \quad (85)$$

В свою очередь для этой задачи двойственной является (79). Поэтому задачи (79) и (85) можно назвать взаимно двойственными.

В задаче (85) можно исключить переменные z_2 , выразив их через z_1 и подставив $z_2 = (1/\sqrt{\varepsilon})A^\top z_1$ в целевую функцию задачи (85). Тогда приходим к следующей эквивалентной задаче безусловной максимизации строго вогнутой квадратичной функции:

$$\max_{z_1 \in \mathbb{R}^m} \left(b^\top z_1 - \frac{1}{2} \|z_1\|^2 - \frac{1}{2\varepsilon} \|A^\top z_1\|^2 \right). \quad (86)$$

Таким образом, эту задачу можно назвать двойственной к задаче (79). Тогда для взаимно двойственных задач (79) и (86) по теореме слабой двойственности для любых $z_1 \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$ справедливо неравенство

$$b^\top z_1 - \frac{1}{2} \|z_1\|^2 - \frac{1}{2\varepsilon} \|A^\top z_1\|^2 \leq \frac{1}{2} (\|b - Ax\|^2 + \varepsilon \|x\|^2),$$

а по теореме двойственности оптимальные значения целевых функций этих задач совпадают:

$$b^\top z_1(\varepsilon) - \frac{1}{2} \|z_1(\varepsilon)\|^2 - \frac{1}{2\varepsilon} \|A^\top z_1(\varepsilon)\|^2 = \frac{1}{2} (\|b - Ax(\varepsilon)\|^2 + \varepsilon \|x(\varepsilon)\|^2). \quad (87)$$

Здесь $z_1(\varepsilon)$ — решение задачи (86). Задачи квадратичного программирования (79), (85), (86) имеют единственные решения, которые связаны между собой следующими соотношениями:

$$z_1(\varepsilon) = b - Ax(\varepsilon), \quad z_2(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon}x(\varepsilon), \quad (88)$$

$$x(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} A^\top z_1(\varepsilon). \quad (89)$$

В этом легко убедиться, подставляя выражение (89) для $x(\varepsilon)$ в необходимые и достаточные условия оптимальности для задачи (79)

$$-A^\top(b - Ax(\varepsilon)) + \varepsilon x(\varepsilon) = 0_n \quad (90)$$

и подставляя выражение (88) для $z_1(\varepsilon)$ в необходимые и достаточные условия оптимальности для задачи (86)

$$b - z_1(\varepsilon) - \frac{1}{\varepsilon} AA^\top z_1(\varepsilon) = 0_m. \quad (91)$$

Равенство (87) оптимальных значений целевых функций взаимно двойственных задач (79) и (86) с учетом связей (88), (89) между решениями $x(\varepsilon)$ и $z(\varepsilon)$ можно представить в следующих двух видах, в которых присутствуют решения только одной из задач:

$$b^\top z_1(\varepsilon) = \|z(\varepsilon)\|^2, \quad (92)$$

$$b^\top(b - Ax(\varepsilon)) = \|b - Ax(\varepsilon)\|^2 + \varepsilon \|x(\varepsilon)\|^2. \quad (93)$$

Из (93) следует $\varepsilon \|x(\varepsilon)\|^2 = z_1(\varepsilon)^\top Ax(\varepsilon)$. Отсюда получаем известный результат применения метода наименьших квадратов: при $\varepsilon = 0$ имеет место $z_1(0) \perp Ax(0)$. Заметим, что если система (78) не совместна, то $z_1(0) \neq 0$.

Задача (86) при любом $\varepsilon > 0$ и любом ранге матрицы A может быть явно разрешена:

$$z_1(\varepsilon) = \varepsilon(\varepsilon I_m + AA^\top)^{-1}b. \quad (94)$$

Подставляя это выражение в (89), получаем еще одну формулу для вычисления решения $x(\varepsilon)$ задачи (79):

$$x(\varepsilon) = A^\top(\varepsilon I_m + AA^\top)^{-1}b. \quad (95)$$

В этой формуле требуется обращать матрицу порядка m в отличие от формулы (80), в которой требуется обращать матрицу порядка n . Поэтому если в задаче (78) $m < n$, то для вычисления $x(\varepsilon)$ целесообразно использовать формулу (95) или (89). В случае применения последней формулы требуется решать задачу безусловной оптимизации (86) с m неизвестными.

Выражение (95) для вычисления $x(\varepsilon)$ также можно представить в другом виде с использованием формулы Шермана–Моррисона–Вудбери

$$x(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} A^\top(I_m - A(\varepsilon I_n + A^\top A)^{-1}A^\top)b. \quad (96)$$

В этой формуле требуется обращать матрицу порядка n в отличие от формулы (95), в которой обращается матрица порядка m .

В [17] показано, что для всякой матрицы A из системы (78) следующим образом определена псевдообратная матрица A^+ :

$$A^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varepsilon I_n + A^T A)^{-1} A^T = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A^T (\varepsilon I_m + A A^T)^{-1} \quad (97)$$

и при любом векторе b (в том числе и при b , делающем систему (78) несовместной) вектор $\tilde{x}_* = A^+ b$ является вектором с минимальной нормой среди всех векторов, минимизирующих $\|b - Ax\|^2$.

В [16] предложен другой метод нахождения нормального решения системы (78), основанный на применении теорем об альтернативах. При этом для несовместной альтернативной к (78) системы

$$A^T u = 0_n, \quad b^T u = \rho \neq 0 \quad (98)$$

решается следующая задача минимизации ее невязок:

$$\min_{u \in \mathbb{R}^m} \frac{1}{2} [\|A^T u\|^2 + (\rho - b^T u)^2]. \quad (99)$$

Здесь ρ — произвольная ненулевая константа.

Пусть u_* — решение задачи безусловной минимизации (99). Тогда нормальное решение исходной системы (78) выражается по формуле

$$\tilde{x}_* = \frac{A^T u_*}{\rho - b^T u_*}. \quad (100)$$

Если в исходной системе ранг матрицы A равен m , то решение задачи (99) находится аналитически

$$u_* = \rho (A A^T + b b^T)^{-1} b. \quad (101)$$

Подставляя эту формулу в (100), получаем еще одно выражение для нормального решения системы (78):

$$\tilde{x}_* = \frac{A^T (A A^T + b b^T)^{-1} b}{1 - b^T (A A^T + b b^T)^{-1} b}. \quad (102)$$

Литература

1. Тихонов А.Н. О некорректных задачах оптимального планирования // Журн. вычислит. матем. и матем. физ. 1966. Т. 6. № 1. С. 81–90.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
3. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983.
4. Васильев Ф.П., Иваницкий А.Ю. Линейное программирование. М.: Факториал, 1998.
5. Еремин И.И. Теория линейной оптимизации. Екатеринбург, УрО РАН, 1998.
6. Mangasarian O.L., Meyer R.R. Nonlinear perturbation of linear programs // SIAM J. Control and Optimizat. 1979. V. 17. № 6. P. 745–752.
7. Mangasarian O.L. Normal solutions of linear programs // Math. Program. Study. 1984. V. 22. P. 206–216.
8. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации. М.: Мир, 1972.

9. *Удзава Х.* Итерационные методы вогнутого программирования / К. Дж. Эрроу, Л. Гурвиц, Х. Удзава. Исследования по линейному и нелинейному программированию. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. С. 228–245.
10. *Еремин И.И., Астафьев Н.Н.* Введение в теорию линейного и выпуклого программирования. М.: Наука, 1976.
11. *Еремин И.И.* О квадратичных и полноквадратичных задачах выпуклого программирования // Известия ВУЗов. Математика. 1998. № 12. С. 22–28.
12. *Golikoy A.I., Evtushenko Yu.G.* Two Parametric Families of LP Problems and Their Applications // Proceedings of Steklov Institute of Mathematics, Suppl. 1. 2002. P. S52–S66.
13. *Тихонов А.Н.* О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения // ДАН СССР. 1965. Т. 163. № 4. С. 591–594.
14. *Ортега Дж., Рейнболдт В.* Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
15. *Mangasarian O.L.* Nonlinear Programming. New York: McGraw-Hill, 1969.
16. *Голиков А.И., Евтушенко Ю.Г.* Теоремы об альтернативах и их применение в численных методах // Журн. вычислит. матем. и матем. физики. 2003. Т. 43. № 3. С. 354–375.
17. *Альбер А.* Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1977.