Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Журнал обчислювальної та прикладної

2015 **МАТЕМАТИКИ** 1(118)

Заснований в 1965 році

Головний редактор С. І. Ляшко

Редакційна колегія

Ф. Г. Гаращенко, О. Ю. Грищенко, О. К. Закусило, М. З. Згуровський, І. М. Ляшенко, В. Л. Макаров, О. Г. Наконечний, І. М. Парасюк, І. В. Сергієнко, О. Б. Стеля (відп. секретар), Д. Я. Хусаінов, А. О. Чикрій

Серія "Прикладна математика"

Головний редактор серії О. Ю. Грищенко

Редакційна колегія серії

В. М. Булавацький, О. Я. Григоренко, В. Ф. Губарєв, Д. А. Клюшин, О. М. Новіков, Т. Є. Романова, А. Г. Руткас, В. М. Терещенко

Серія "Оптимізація"

Головний редактор серії С. І. Ляшко

Редакційна колегія серії

Ю. М. Данілін, В. В. Семенов

Міжнародна редакційна рада

Л. Берковиць (США), І. Гаврилюк (Німеччина), Ю. Гальперін (Канада), Б. Голденгорін (Голландія), Ю. Єрмольєв (Австрія), Ф. Імаго (Японія), Я. Кравчак (Н. Зеландія), Б. Мордухович (США), П. Пардалос (США), Н. Хритоненко (США), Ю. Яценко (США)

Макет І. П. Сіренко

Адреса редколегії:

Кафедра обчислювальної математики, факультет кібернетики,
Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська 64, Київ, МСП 01601, Україна.

E-mail: opmjournal@gmail.com html://www.opmj.univ.kiev.ua

Затверджено Вченою радою факультету кібернетики
9 грудня 2014 року, протокол №3

©Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 2015
©"ТВіМС", 2015

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ 4246 від 26.05.2000
Підписано до друку 9 грудня 2014 р.

Для публікації в журналі приймаються не опубліковані раніше наукові праці з провідних методів дослідження та розв'язування задач оптимізації, обчислювальної математики, математичної фізики, теорії фільтрації, теорії пружності, математичної кібернетики, теорії управління та інших напрямків.

У журналі публікуються статті українською, російською й англійською мовами.

Стаття у друкованому вигляді з підписами авторів подається особисто або електронною поштою з подальшим дублюванням на папері в одному примірнику.

До статті додається анкета автора (-ів): ПІБ автора(-ів) українською, російською й англійською мовами, учені ступені та звання, місце роботи та посада, адреса проживання й організації, телефон, факс, електронна пошта тощо та додаткова інформація: назва статті, резюме та ключові слова українською, російською й англійською мовами на електронному носії особисто або електронною поштою (див."Анкета автора" на сайті журналу www.opmj.univ.kiev.ua).

Обсяг статті не має перевищувати 12 сторінок, включаючи резюме (обсягом до 500 друкованих знаків, яке містить коротку характеристику досліджуваної проблеми, мету роботи й конкретну інформацію про отримані результати), рисунки, таблиці, графіки, список літератури та індекс УДК. Текст статті повинен відповідати структурній схемі: короткий літературний огляд проблеми, що розглядається; мета дослідження; постановка задачі та її актуальність; методи її вирішення й отримані результати; висновки про наукову новизну та практичне значення результатів. Використана література наводиться загальним списком наприкінці статті за порядком її згадування в тексті (посилання у тексті — арабськими цифрами у квадратних дужках) мовою оригіналу, відповідно до ГОСТу 7.1:2006 (ознайомитися можна на сайті). Стаття має бути підготовлена за допомогою редактора LaTeX.

Редактор LaTeX може бути наданий або надісланий на електронному носії поштою на прохання автора. Додаткову інформацію, шаблони статті та анкету автора можна знайти на сайті журналу.

Місцезнаходження редакції: Україна, 01601, м. Київ, просп. Глушкова 4д, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, факультет кібернетики, к. 218, редакція журналу "Журнал обчислювальної та прикладної математики", e-mail: opmjournal@gmail.com.

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, № 1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.93

АСИМПТОТИЧЕСКИ ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ В ДИСКРЕТНЫХ ЗАДАЧАХ С БЫСТРЫМИ И МЕДЛЕННЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

И. А. Бойцова

Резюме. В работе рассмотрена задача оптимального управления, дискретные уравнения которой содержат быстрые и медленные переменные. Для решения задачи применен метод усреднения. Доказано, что оптимальное управление усредненной задачи при определенных условиях является асимптотически оптимальным управлением исходной задачи.

Введение

Интерес к дискретным уравнениям известен давно, однако внедрение компьютерной техники привело к разработке большинства алгоритмов численного решения алгебраических и дифференциальных уравнений, сводящихся к решению дискретных уравнений. Их также удобно использовать для моделирования различных управляемых процессов.

При рассмотрении управляемых систем дискретных уравнений возникает вопрос о существовании оптимального управления и алгоритмах его нахождения. Необходимые и достаточные условия оптимальности, дискретный принцип максимума приведены в работах [1]–[3].

Применение асимптотических методов позволяет упростить процедуру нахождения решения. В работах [4], [5] приводится обоснование метода усреднения для решения систем дискретных уравнений, содержащих малый параметр. В работе [6] доказана более общая схема усреднения дискретных уравнений, которая применяется для решения соответствующих задач управления и оптимального управления.

Моделирование процессов, в которых изменение состояния системы происходит с разными скоростями составляющих движения, проводится при помощи систем уравнений с быстрыми и медленными переменными, что позволяет расширить круг исследуемых задач. Применение метода усреднения для исследования непрерывных процессов обосновано в работе [7], для дискретных — в работе [8]. Алгоритмы построения асимптотически оптимального управления в дискретной задаче по найденному оптимальному управлению усредненной задачи обоснованы в работах [9], [10].

Интерес представляют работы [11], [12], в них приводятся условия, при которых оптимальное управление усредненной задачи является асимптотически оптимальным управлением заданной непрерывной задачи.

Аналогичный результат в данной работе получен для дискретных задач.

1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу оптимального управления, которая описывается системой дискретных уравнений с быстрыми и медленными переменными

$$x_{i+1} = x_i + \varepsilon \cdot X\left(i, x_i, y_i, u_i, \varepsilon\right), \qquad x_0 = x^0,$$
$$y_{i+1} = Y\left(i, x_i, y_i, \varepsilon\right), \qquad y_0 = y^0 \tag{1}$$

и терминальным критерием качества

$$J(u) = \Phi\left(x_N\right) \to \min_{u \in U}, \tag{2}$$

где $x_i \in D_x \subset R^n$ — вектор медленных переменных, $y_i \in D_y \subset R^m$ — вектор быстрых переменных, которые определяют текущее состояние системы в момент дискретного времени $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$, $L = const$, $E(c)$ – целая часть числа c, $\varepsilon > 0$ — малый параметр, $X\left(i, x_i, y_i, u_i, \varepsilon\right)$ — заданная n-мерная функция, $Y\left(i, x_i, y_i, \varepsilon\right)$ — заданная m-мерная функция, $\Phi\left(x_N\right)$ — скалярная функция, $u_i \in U \subset comp\left(R^r\right)$ — текущее r-мерное управление, принимающее значения из компактного множества U, значения x^0, y^0 определяют начальное состояние системы.

Условие 1. Пусть для функций $X\left(i, x_i, y_i, u_i, \varepsilon\right)$ и $Y\left(i, x_i, y_i, \varepsilon\right)$ из системы (1) существуют постоянные $M_i > 0$, $K_i > 0$ и $M^* > 0$, $K^* > 0$, $\lambda > 0$, существуют неубывающие функции $\psi_j(\alpha)$, $j = 1, 2, ..., 5$, для которых $\lim\limits_{\alpha \to 0} \psi_j(\alpha) = 0$, что при всех $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$ выполняются следующие неравенства:

A) $\left\|X\left(i, x^1, y^1, u^1, \varepsilon\right) - X\left(i, x^2, y^2, u^2, 0\right)\right\| \leq$
$$\leq K_i \cdot \left(\psi_1\left(\left\|x^1 - x^2\right\|\right) + \psi_2\left(\left\|y^1 - y^2\right\|\right) + \psi_3\left(\varepsilon\right)\right) + \lambda\left\|u^1 - u^2\right\|;$$

B) $\left\|Y\left(i, x^1, y^1, \varepsilon\right) - Y\left(i, x^2, y^2, 0\right)\right\| \leq$
$$\leq K_i \cdot \left(\psi_4\left(\left\|x^1 - x^2\right\|\right) + \left\|y^1 - y^2\right\| + \psi_5\left(\varepsilon\right)\right);$$

C) $\left\|X\left(i, x_i, y_i, u_i, \varepsilon\right)\right\| \leq M_i$;

причем для любых целочисленных $s \geq 0$ и $h > 0$ справедливы соотношения:

$$\frac{1}{h}\sum_{i=s}^{s+h-1} M_i \leq M^*, \quad \frac{1}{h}\sum_{i=s}^{s+h-1} K_i \leq K^*.$$

Условие 2. Пусть для функции $\Phi(x)$ из критерия качества (2) выполняется условие Липшица с постоянной $\lambda > 0$:

$$\left\|\Phi\left(x^1\right) - \Phi\left(x^2\right)\right\| \leq \lambda\left\|x^1 - x^2\right\|.$$

Определение 1. Допустимыми управлениями системы (1) назовем функции $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ из компактного множества U, для которых:

A) найдется постоянное допустимое управление $u^0 \in U$, найдутся константы $H_i > 0$ и $H^* > 0$ такие, что $\left\|u_i - u^0\right\| \leq H_i$, $i \in I$, где H_i не зависят от $u \in U$ и для любых целочисленных $s \geq 0$ и $h > 0$ справедливо соотношение $\sum\limits_{i=s}^{s+h-1} H_i \leq H^*$;

В) найдется такое $\varepsilon_0 > 0$, не зависящее от $u \in U$, что для всех $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ соответствующие решения $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$, $y = \{y_i \in D_y, i \in I\}$ задачи управления (1) определены для любого $i \in I$ и принадлежат замкнутому множеству $D = \{x_i \in D_x, y_i \in D_y, i \in I\}$.

Определение 2. Оптимальным управлением задачи (1), (2) назовем такое допустимое управление $u^* = \{u_i^* \in U, i \in I\}$, при котором критерий качества (2) принимает минимальное значение $J(u^*) = \min\limits_{u \in U} J(u)$.

Можно показать, что при выполнении условий 1, 2 выполняются условия теоремы 1 [2], следовательно для дискретной задачи (1), (2) существует оптимальное управление $u^* = \{u_i^* \in U, i \in I\}$ и соответствующая оптимальная траектория $x^* = \{x_i^* \in D_x, i \in I\}$, $y^* = \{y_i^* \in D_y, i \in I\}$ при любом начальном состоянии $\left(x^0, y^0\right)$, при этом критерий качества (2) на оптимальном управлении принимает конечное значение $J^* = J(u^*) = \min\limits_{u \in U} J(u)$.

2. Построение усредненной задачи

Для построения усредненной задачи оптимального управления рассмотрим соответствующую вырожденную задачу, которая получается из системы (1) при $\varepsilon = 0$, медленную переменную x_i при этом считаем параметром

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i, & x_0 &= x^0, \\ y_{i+1} &= Y(i, x_i, y_i, 0), & y_0 &= y^0. \end{aligned} \tag{3}$$

Условие 3. Пусть функции $\gamma_i = y\left(i, x_i, y^0, 0\right)$ определены при всех $i \geq 0$, а при $i \in I$ представляют собой решение вырожденной задачи (3).

Условие 4. Пусть равномерно относительно целочисленного $s \geq 0$, параметров $x \in D_x$, $u \in U$ и значения $y^0 \in D_y$ вдоль решения вырожденной задачи (3) существует предельная функция

$$X_0(x, u) = \lim_{h \to \infty} \frac{1}{h} \sum_{i=s}^{s+h-1} X\left(i, x, y\left(i, x, y^0, 0\right), u, 0\right), \tag{4}$$

которая удовлетворяет условию Липшица по x с постоянной λ.

Задаче оптимального управления (1), (2) поставим в соответствие усредненную задачу оптимального управления, которая описывается системой

$$z_{i+1} = z_i + \varepsilon \cdot X_0(z_i, v_i), \qquad z_0 = x^0 \tag{5}$$

и терминальным критерием качества

$$J_0(v) = \Phi(z_N) \to \min_{v \in U}, \tag{6}$$

где $v = \{v_i \in U, i \in I\}$ — допустимые управления системы (5), которые выбираются из того же компактного множества U.

Через $v^* = \{v_i^* \in U, i \in I\}$ обозначим оптимальное управление задачи (5), (6), которое в силу выполнения условий 1–4 всегда существует вместе с оптимальной траекторией $z^* = \{z_i^* \in D_x, i \in I\}$, при этом критерий качества (6) на оптимальном управлении принимает конечное значение $J_0^* = J_0(v^*) = \min\limits_{v \in U} J_0(v)$.

3. Асимптотическое решение задачи

Докажем, что допустимые управления для систем (1) или (5) обеспечивают построение соответствующих траекторий исходной и усредненной систем, которые близки на асимптотически большом промежутке дискретного времени.

Теорема 1. *Пусть для систем дискретных уравнений (1) и (5) в области* $Q = \{i \in I; x \in D_x; y \in D_y; u \in U, \varepsilon \geq 0\}$ *выполнены условия 1,3,4.*

Кроме того:

1) *для любого допустимого управления* $v = \{v_i \in U, i \in I\}$ *усредненной системы (5) соответствующая траектория* $z = \{z_i, i \in I\}$ *при условии* $z_0 = x^0 \in D_0 \subset D_x$ *вместе со своей* ρ*-окрестностью принадлежит области* D_x.

Тогда для любых $\eta > 0$ *и* $L > 0$ *существует* $\varepsilon_0(\eta, L) > 0$ *такое, что для всех* $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ *и* $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$ *выполняется следующее:*

I) *любое допустимое управление* $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ *системы (1) является допустимым управлением усредненной системы (5), при этом соответствующие траектории* $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$ *системы (1) и* $z = \{z_i \in D_x, i \in I\}$ *усредненной системы (5) при условии* $x_0 = z_0 = x^0 \in D_0 \subset D_x$ *удовлетворяют неравенству*

$$\|x_{i+1} - z_{i+1}\| < \eta; \tag{7}$$

II) *любое допустимое управление* $v = \{v_i \in U, i \in I\}$ *усредненной системы (5) является допустимым управлением системы (1), при этом соответствующие траектории* $z = \{z_i \in D_x, i \in I\}$ *усредненной системы (5) и* $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$ *системы (1) при условии* $z_0 = x_0 = x^0 \in D_0 \subset D_x$ *удовлетворяют неравенству (7).*

Доказательство. Докажем первую часть теоремы. Для этого выберем допустимое управление $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ задачи (1), тогда $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$, $y = \left\{y_i = y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right) \in D_y, i \in I\right\}$ — соответствующая траектория этой системы. Пусть $\gamma = \left\{\gamma_i = y\left(i, x_i, y^0, 0\right) \in D_y, i \in I\right\}$ — решение вырожденной задачи (3). Управление $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ выберем так, чтобы оно было допустимым и для усредненной задачи (5), тогда $z = \{z_i \in D_x, i \in I\}$ – соответствующая этому управлению траектория усредненной системы.

Выберем произвольное значение $0 < \eta < \rho$ и зафиксируем его.

Для доказательства утверждения теоремы сначала рассмотрим и оценим разность между быстрыми решениями системы (1) и вырожденной задачи (3). При выполнении условий 1, 3 получим

$$\left\|y\left(i+1, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i+1, x^0, y^0, 0\right)\right\| =$$

$$= \left\|Y\left(i, x_i, y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right), \varepsilon\right) - Y\left(i, x^0, y\left(i, x^0, y^0, 0\right), 0\right)\right\| \leq$$

$$\leq K_i \cdot \left(\psi_4\left(\left\|x_i - x^0\right\|\right) + \left\|y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i, x^0, y^0, 0\right)\right\| + \psi_5(\varepsilon)\right) \leq$$

$$\leq K_i \cdot \left\|y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i, x^0, y^0, 0\right)\right\| +$$

$$+K_i \cdot \psi_4 \left(\varepsilon \sum_{j=0}^{i} \|X\left(j, x_j, y_j, u_j, \varepsilon\right)\| \right) + K_i \cdot \psi_5\left(\varepsilon\right) \leq$$

$$\leq K_i \cdot \left\|y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i, x^0, y^0, 0\right)\right\| + K_i \cdot \psi_4 \left(\varepsilon \sum_{j=0}^{i} M_j \right) + K_i \cdot \psi_5\left(\varepsilon\right) \leq$$

$$\leq K_i \cdot \left\|y\left(i, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i, x^0, y^0, 0\right)\right\| + K_i \cdot \left(\psi_4\left(\varepsilon i M^*\right) + \psi_5\left(\varepsilon\right)\right). \qquad (8)$$

Легко показать, что из рекуррентного соотношения

$$\delta_{i+1} \leq a \cdot \delta_i + b \qquad (9)$$

для любого $i \in I$ следует

$$\delta_{i+1} \leq a^{i+1} \cdot \delta_0 + b \cdot \frac{a^i - 1}{a - 1}. \qquad (10)$$

Учитывая, что $\delta_0 = y\left(0, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(0, x^0, y^0, 0\right) = y^0 - y^0 = 0$, из соотношения (8), получим

$$\left\|y\left(i+1, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i+1, x^0, y^0, 0\right)\right\| \leq$$

$$\leq \left(\psi_4\left(\varepsilon i M^*\right) + \psi_5\left(\varepsilon\right)\right) \cdot K_i \cdot \frac{\left(K_i\right)^i - 1}{K_i - 1} = \beta\left(i, \varepsilon\right). \qquad (11)$$

Введенная в рассмотрение функция $\beta\left(i, \varepsilon\right)$ в силу свойств функций $\psi_4(\alpha)$ и $\psi_5(\alpha)$ при фиксированном ε является монотонно возрастающей по переменной i. Однако при фиксированном i обладает свойством $\lim\limits_{\varepsilon \to 0} \beta\left(i, \varepsilon\right) = 0$. Исходя из этого, найдем значение $i^*(\varepsilon)$, как корень уравнения

$$\left(\psi_4\left(\varepsilon i M^*\right) + \psi_5\left(\varepsilon\right)\right) \cdot K_i \cdot \frac{\left(K_i\right)^i - 1}{K_i - 1} = C\sqrt{\varepsilon},$$

где $C > 0$ — некоторая константа. Тогда $\beta\left(i^*(\varepsilon), \varepsilon\right) = C\sqrt{\varepsilon} \to 0$ при $\varepsilon \to 0$.

Определим функцию

$$h\left(\varepsilon\right) = \min\left\{ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}};\ i^*\left(\varepsilon\right) \right\}, \qquad (12)$$

которая обладает свойствами

$$\lim_{\varepsilon \to 0} h\left(\varepsilon\right) = +\infty, \quad \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon h\left(\varepsilon\right) = 0. \qquad (13)$$

На множестве $I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$ зафиксируем точки kh, отстоящие друг от друга на расстоянии $h\left(\varepsilon\right)$, при этом получим медленно меняющееся время

$$k \in I_k = \left\{0, 1, 2, ..., N_k\right\}, \quad N_k = E\left(\frac{L}{\varepsilon h}\right). \qquad (14)$$

Для произвольного момента времени $i \in I$ определим соответствующее значение медленного времени $k \in I_k$ такое, что $i \in [kh, (k+1) \cdot h - 1)$. Тогда на каждом k-ом промежутке получим оценку разности между быстрыми решениями задачи (1) и вырожденной задачи (3) в виде

$$\left\|y\left(i+1, x^0, y^0, \varepsilon\right) - y\left(i+1, x^0, y^0, 0\right)\right\| \leq \beta\left(h(\varepsilon), \varepsilon\right) \leq C\sqrt{\varepsilon}. \qquad (15)$$

Теперь проведем оценку разности между медленными решениями задачи (1) и усредненной задачи (5). Для любого $i \in [kh, (k+1)\cdot h - 1)$, $k \in I_k$ справедливо неравенство

$$\|x_{i+1} - z_{i+1}\| \le \|x_{i+1} - x_{kh}\| + \|x_{kh} - z_{kh}\| + \|z_{kh} - z_{i+1}\|. \qquad (16)$$

Для оценки первого и третьего слагаемых в (16) системы дискретных уравнений (1) и (5) представим в виде

$$x_{i+1} = x_{kh} + \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} X\left(j, x_j, y_j, u_j, \varepsilon\right), \qquad z_{i+1} = z_{kh} + \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} X_0\left(z_j, u_j\right),$$

тогда

$$\|x_{i+1} - x_{kh}\| \le \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} \|X\left(j, x_j, y_j, u_j, \varepsilon\right)\| \le \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} M_j \le \varepsilon h M^*, \qquad (17)$$

$$\|z_{i+1} - z_{kh}\| \le \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} \|X_0\left(z_j, u_j\right)\| \le \varepsilon \sum_{j=kh}^{i} M_j \le \varepsilon h M^*. \qquad (18)$$

Для оценки второго слагаемого в (16) системы дискретных уравнений (1) и (5) представим в виде

$$x_{(k+1)h} = x_{kh} + \varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X\left(j, x_j, y_j, u_j, \varepsilon\right),$$

$$z_{(k+1)h} = z_{kh} + \varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X_0\left(z_j, u_j\right),$$

тогда

$$\left\|x_{(k+1)h} - z_{(k+1)h}\right\| \le \|x_{kh} - z_{kh}\| +$$

$$+\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left(X\left(j, x_j, y\left(j, x^0, y^0, \varepsilon\right), u_j, \varepsilon\right) - X_0\left(z_j, u_j\right)\right) \right\| \le$$

$$\le \|x_{kh} - z_{kh}\| +$$

$$+\varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left\|X\left(j, x_j, y\left(j, x^0, y^0, \varepsilon\right), u_j, \varepsilon\right) - X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y_{kh}, \varepsilon\right), u^0, \varepsilon\right)\right\| +$$

$$+\varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left\|X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y_{kh}, \varepsilon\right), u^0, \varepsilon\right) - X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y^0, 0\right), u^0, 0\right)\right\| +$$

$$+\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y^0, 0\right), u^0, 0\right) - hX_0\left(x_{kh}, u^0\right) \right\| +$$

$$+\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X_0\left(x_{kh}, u^0\right) - X_0\left(z_{kh}, u^0\right) \right\| +$$

$$+\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X_0\left(z_{kh}, u^0\right) - X_0\left(z_j, u_j\right) \right\|, \tag{19}$$

где управление $u^0 \in U$ удовлетворяет условию A из определения 1.

В неравенстве (19) оценим каждое слагаемое отдельно. Для второго слагаемого при выполнении условия 1, неравенства (17) и условия A из определения 1 получим

$$\varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left\| X\left(j, x_j, y\left(j, x^0, y^0, \varepsilon\right), u_j, \varepsilon\right) - X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y_{kh}, \varepsilon\right), u^0, \varepsilon\right) \right\| \leq$$

$$\leq \varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left(K_j \cdot \psi_1\left(\left\|x_j - x_{kh}\right\|\right) + \lambda \cdot \left\|u_j - u^0\right\|\right) \leq$$

$$\leq \varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left(K_j \cdot \psi_1\left(\varepsilon h M^*\right) + \lambda \cdot H_j\right) \leq$$

$$\leq \varepsilon h K^* \psi_1\left(\varepsilon h M^*\right) + \varepsilon \lambda H^*. \tag{20}$$

Для третьего слагаемого в соотношении (19) при выполнении условия 1 и неравенства (15) получим

$$\varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left\| X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y_{kh}, \varepsilon\right), u^0, \varepsilon\right) - X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y^0, 0\right), u^0, 0\right) \right\| \leq$$

$$\leq \varepsilon \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left(K_i \cdot \left(\psi_2\left(\beta\left(h\left(\varepsilon\right), \varepsilon\right)\right) + \psi_3\left(\varepsilon\right)\right)\right) \leq$$

$$\leq \varepsilon h K^* \left(\psi_2\left(\beta\left(h\left(\varepsilon\right), \varepsilon\right)\right) + \psi_3\left(\varepsilon\right)\right). \tag{21}$$

Для четвертого слагаемого в (19) при выполнении условий 3, 4 найдется монотонно убывающая функция $\varphi(h)$, удовлетворяющая соотношению $\lim\limits_{h\to\infty} \varphi(h) = 0$, что будет выполняться неравенство

$$\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X\left(j, x_{kh}, y\left(j, x_{kh}, y^0, 0\right), u^0, 0\right) - hX_0\left(x_{kh}, u^0\right) \right\| \leq \varepsilon h \varphi\left(h\right). \tag{22}$$

Для пятого слагаемого в (19) при выполнении условия 4 получим

$$\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X_0\left(x_{kh}, u^0\right) - X_0\left(z_{kh}, u^0\right) \right\| \leq \varepsilon h \lambda \left\|x_{kh} - z_{kh}\right\|. \tag{23}$$

Последнее слагаемое оценим при выполнении условий 1, 4, неравенства (18) и условия A из определения 1

$$\varepsilon \left\| \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} X_0\left(z_{kh}, u^0\right) - X_0\left(z_j, u_j\right) \right\| \leq$$

$$\leq \varepsilon\lambda \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \|z_{kh} - z_j\| + \varepsilon\lambda \sum_{j=kh}^{(k+1)h-1} \left\|u^0 - u_j\right\| \leq$$
$$\leq \varepsilon h\lambda \cdot \varepsilon h M^* + \varepsilon\lambda H^*. \tag{24}$$

Из неравенства (19), учитывая оценки (20)–(24), получим рекуррентное соотношение вида

$$\left\|x_{(k+1)h} - z_{(k+1)h}\right\| \leq (1 + \varepsilon h\lambda) \|x_{kh} - z_{kh}\| +$$
$$+\varepsilon h K^* \left[\psi_1(\varepsilon h M^*) + \psi_2(\beta(h,\varepsilon)) + \psi_3(\varepsilon)\right] +$$
$$+\varepsilon h\varphi(h) + \varepsilon h\lambda \cdot \varepsilon h M^* + 2\varepsilon\lambda H^*,$$

из которого на основании неравенств (9), (10) следует оценка для второго слагаемого в (16) в виде

$$\left\|x_{(k+1)h} - z_{(k+1)h}\right\| \leq$$
$$\leq \varepsilon h \left(K^* \left[\psi_1(\varepsilon h M^*) + \psi_2(\beta(h,\varepsilon)) + \psi_3(\varepsilon)\right] + \varphi(h) + \lambda \cdot \varepsilon h M^* + 2\lambda \frac{H^*}{h} \right) \times$$
$$\times \frac{(1 + \varepsilon h\lambda)^k - 1}{(1 + \varepsilon h\lambda) - 1} \leq$$
$$\leq \left(\frac{K^*}{\lambda} \left[\psi_1(\varepsilon h M^*) + \psi_2(\beta(h,\varepsilon)) + \psi_3(\varepsilon)\right] + \frac{1}{\lambda}\varphi(h) + \varepsilon h M^* + 2\frac{H^*}{h} \right) \times$$
$$\times \left[\left((1 + \varepsilon h\lambda)^{\frac{1}{\varepsilon h\lambda}} \right)^{\varepsilon h\lambda k} - 1 \right] \sim$$
$$\sim \left(\frac{K^*}{\lambda} \left[\psi_1(\varepsilon h M^*) + \psi_2(\beta(h,\varepsilon)) + \psi_3(\varepsilon)\right] + \frac{1}{\lambda}\varphi(h) + \varepsilon h M^* + 2\frac{H^*}{h} \right) \times$$
$$\times \left(e^{\lambda L} - 1 \right).$$

Из (16) с учетом полученных оценок (17), (18) следует оценка разности между медленными решениями задачи (1) и усредненной задачи (5) в виде

$$\|x_{i+1} - z_{i+1}\| \leq 2\varepsilon h M^* + \left(e^{\lambda L} - 1 \right) \times$$
$$\times \left(\frac{K^*}{\lambda} \left[\psi_1(\varepsilon h M^*) + \psi_2(\beta(h,\varepsilon)) + \psi_3(\varepsilon)\right] + \frac{1}{\lambda}\varphi(h) + \varepsilon h M^* + 2\frac{H^*}{h} \right).$$

Анализируя полученное неравенство и поведение входящих в него функций, делаем вывод, что правая часть неравенства стремится к 0 при $\varepsilon \to 0$.

Откуда следует, что для любых $0 < \eta < \rho$ и $L > 0$ найдется такое $\varepsilon_0(\eta, L) > 0$, что для всех $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ и $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$ выполняется неравенство

$$\|x_{i+1} - z_{i+1}\| \leq \eta < \rho.$$

Полученная оценка $\|x_{i+1} - z_{i+1}\| < \rho$ означает, что для любого допустимого управления $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ и решения $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$, $y = \{y_i \in D_y, i \in I\}$ системы (1) соответствующее этому же управлению решение $z = \{z_i \in D_x, i \in I\}$ усредненной системы (5) при условии $x_0 = z_0 = x^0 \in D_0 \subset D_x$ находится в ρ-окрестности медленного решения

$x \in D_x$ системы (1) и не выходит на границу множества D_x. Следовательно, выбранное управление $u = \{u_i \in U, i \in I\}$ является допустимым и для усредненной задачи (5), при этом выполняется неравенство (7).

Доказательство второй части теоремы проводится аналогично. При этом полученная оценка $\|x_{i+1} - z_{i+1}\| < \rho$ означает, что для любого допустимого управления $v = \{v_i \in U, i \in I\}$ и решения $z = \{z_i \in D_x, i \in I\}$ усредненной системы (5) соответствующее этому же управлению решение $x = \{x_i \in D_x, i \in I\}$ медленной подсистемы из (1) при условии $z_0 = x_0 = x^0 \in D_0 \subset D_x$ находится в ρ-окрестности решения $z \in D_x$ усредненной системы (5), которая при выполнении условий теоремы полностью принадлежит области D_x. Следовательно, выбранное управление $v = \{v_i \in U, i \in I\}$ является допустимым и для системы (1), при этом справедлива оценка (7). □

4. Асимптотически оптимальное решение задачи

Установим соответствие между оптимальным решением задачи (1), (2) и оптимальным решением усредненной задачи (5), (6) на асимптотически большом промежутке дискретного времени.

Теорема 2. *Пусть для задачи оптимального управления (1), (2) и усредненной задачи (5), (6) в области* $Q = \{i \in I; x \in D_x; y \in D_y; u \in U, \varepsilon \geq 0\}$ *выполнены условия теоремы 1 и условие 2 пункта 1.*

Тогда оптимальное решение усредненной задачи (5), (6) является асимптотически оптимальным решением задачи (1), (2), то есть для любых $\eta > 0$ *и* $L > 0$ *существует* $\varepsilon_0(\eta, L) > 0$ *такое, что для всех* $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ *и* $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$ *справедливы оценки*

$$|J^* - J_0^*| \leq \eta, \qquad J(v^*) - J^* \leq \eta, \tag{25}$$

где J^* *и* J_0^* *— оптимальные значения критериев качества задачи (1), (2) и усредненной задачи (5), (6) соответственно,* $J(v^*)$ *— значение критерия качества задачи (1), (2) на оптимальном управлении* $v^* = \{v_i^* \in U, i \in I\}$ *усредненной задачи (5), (6).*

Доказательство. При выполнении условий теоремы оптимальное управление $u^* = \{u_i^* \in U, i \in I\}$ задачи (1), (2) является допустимым управлением усредненной задачи (5), (6), а $\tilde{z} = \{\tilde{z}_i \in D_x, i \in I\}$ — соответствующее этому управлению решение системы (5). Следовательно, для любых $\eta_0 > 0$ и $L > 0$ найдется такое $\varepsilon_0(\eta_0, L) > 0$, что для всех $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ и $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, $N = E\left(L\varepsilon^{-1}\right)$ выполняется неравенство

$$\|x_i^* - \tilde{z}_i\| \leq \eta_0,$$

где $x^* = \{x_i^* \in D_x, i \in I\}$ — оптимальная траектория задачи (1), (2).

Неравенство справедливо для любого $i \in I = \{0, 1, 2, ..., N\}$, значит и для $i = N$. При выполнении условия 2 получим

$$\left|J^* - \tilde{J}_0\right| = |J(u^*) - J_0(u^*)| = |\Phi(x_N^*) - \Phi(\tilde{z}_N)| =$$
$$= \lambda \|x_N^* - \tilde{z}_N\| \leq \lambda\eta_0 = \eta. \tag{26}$$

Аналогично, оптимальное управление $v^* = \{v_i^* \in U, i \in I\}$ усредненной задачи (5), (6) является допустимым управлением задачи (1), (2), а $\tilde{x} = \{\tilde{x}_i \in D_x, i \in I\}$ — соответствующее этому управлению решение системы (1). Следовательно, выполняется неравенство

$$\|z_i^* - \tilde{x}_i\| \le \eta_0$$

и соответственно

$$\left|J_0^* - \tilde{J}\right| = |J_0(v^*) - J(v^*)| = |\Phi(z_N^*) - \Phi(\tilde{x}_N)| =$$

$$= \lambda \|z_N^* - \tilde{x}_N\| \le \lambda\eta_0 = \eta, \tag{27}$$

где $z^* = \{z_i^* \in D_x, i \in I\}$ — оптимальная траектория задачи (5), (6).

Для оптимальных значений критериев качества (2) и (6) очевидными являются неравенства

$$J^* \le \tilde{J}, \qquad J_0^* \le \tilde{J}_0 \tag{28}$$

и одно из соотношений

$$J^* \ge J_0^* \quad \text{или} \quad J^* < J_0^*. \tag{29}$$

В первом случае из неравенств (28), (29), (27) следует

$$\tilde{J} \ge J^* \ge J_0^* \ge \tilde{J} - \eta,$$

откуда

$$|J_0^* - J^*| \le \eta.$$

Во втором случае из неравенств (28), (29), (26)

$$\tilde{J}_0 \ge J_0^* > J^* \ge \tilde{J}_0 - \eta,$$

откуда

$$|J_0^* - J^*| \le \eta.$$

В обоих случаях выполняется первое неравенство из (25). Выполнение второго неравенства в (25) следует из (27) и полученного неравенства. □

Выводы

В работе рассмотрена задача оптимального управления, которая описывается системой дискретных уравнений с быстрыми и медленными переменными и терминальным критерием качества. Проанализируем условия, наложенные на задачу.

Условия, аналогичные условию 1, приведены в работе [7] для систем дифференциальных уравнений с быстрыми и медленными переменными и гарантируют существование решения такой системы. В данной работе эти условия распространены на управляемые системы дискретных уравнений. Условия 1 А) и 1 В) являются обобщением условия Липшица, применительно к дискретным управляемым системам, содержащим быстрые и медленные переменные. Поэтому, если на допустимых управлениях выполнены условия 1, 2 пункта 1, то задача оптимального управления является разрешимой. Это означает, что существует оптимальное управление и соответствующая оптимальная траектория, на которых критерий качества

принимает конечное значение. Этот вывод следует из теоремы 1, приведенной в работе [2].

Условия 3, 4 пункта 3 обеспечивают возможность построения усредненной задачи оптимального управления, содержащей только медленные переменные, однако на поведение которых влияет поведение быстрых переменных. Аналогичные условия при построении усредненной задачи для систем дифференциальных уравнений с быстрыми и медленными переменными приведены в работе [7]. В данной работе они распространены на управляемые системы дискретных уравнений. Отметим, что полученная усредненная задача оптимального управления оказалась автономной и содержит только медленные переменные, то есть стала гораздо проще исходной.

Условие, аналогичное условию А) в определении допустимого управления, применяется при усреднении управляемых систем дифференциальных уравнений стандартного вида в работах [11], [12]. В данной работе оно распространено на управляемые системы дискретных уравнений с быстрыми и медленными переменными. Выполнение этого условия вместе с условием 1) теоремы позволяет утверждать, что допустимое управление исходной задачи является допустимым управлением усредненной задачи, а соответствующие этому управлению траектории исходной и усредненной задач являются близкими на асимптотически большом промежутке дискретного времени. Справедливо и обратное утверждение о том, что допустимое управление усредненной задачи является допустимым управление исходной задачи, а соответствующие этому управлению траектории систем близки.

Выполнение условия А) из определения допустимого управления позволяет избавиться от использования сложных алгоритмов установления соответствия между допустимыми управлениями исходной задачи и допустимыми управлениями усредненной задачи, которые применялись в работах [6], [9], [10]. Это касается и алгоритмов построения асимптотически оптимального управления для исходной задачи, если найдено оптимальное управление усредненной задачи.

В теореме 2 доказывается, что одно из допустимых управлений усредненной задачи, которое является оптимальным управлением, может быть взято в качестве асимптотически оптимального управления исходной задачи с быстрыми и медленными переменными. При этом соответствующие траектории задач оптимального управления будут близки на асимптотически большом промежутке дискретного времени, кроме того близкими будут и соответствующие значения критериев качества.

Литература

1. Бутковский А. Г. О необходимых и достаточных условиях оптимальности для импульсных систем управления. // Автоматика и телемеханика. — 1963. — Т. 24, №8. — С. 1056–1064.
2. Пропой А. И. О принципе максимума для дискретных систем управления. // Автоматика и телемеханика. — 1965. — Т. 26, №7. — С. 1177–1187.

3. Афанасьев В. Н., Колмановский В. Б., Носов В. Р. Математическая теория конструирования систем управления. — М: Высшая школа, 1998. — 574 с.
4. Белан Е. Л. О методе усреднения в теории конечно-разностных уравнений. // Украинский математический журнал. — 1967. — Т. 19, №3. — С. 85–90.
5. Мартынюк Д. И., Данилов В. И., Паньков В. Г. Вторая теорема Н. Н. Боголюбова для систем разностных уравнений. // Украинский математический журнал. — 1996. — Т. 48, №4. — С. 464–475.
6. Плотников В. А., Плотникова Л. И., Яровой А. Т. Метод усреднения дискретных систем и его приложение к задачам управления. // Нелинейные колебания. — 2004. — Т. 7, №2. — С. 241–254.
7. Хапаев М. М. Усреднение в теории устойчивости. — М: Наука, 1986. — 192 с.
8. Бойцова И. А. Метод усреднения в системах дискретных уравнений с быстрыми и медленными переменными. // Вестник ОНУ. Математика и механика. — 2008. — Т. 13, Вып. 18. — С. 7–22.
9. Бойцова И. А. Численно-асимптотический метод решения дискретных задач оптимального управления с быстрыми и медленными переменными // Вестник БГУ. Сер. I. — 2011. — № 1. — С. 105–110.
10. Бойцова И. А. Усреднение дискретных уравнений с быстрыми и медленными переменными в задачах управления. [Электронный ресурс] // XII Всерос. совещание по проблемам управления ВСПУ-2014.: Труды. — М.: Институт проблем управления имени В. А. Трапезникова РАН — 2014. — С. 503–514.
11. Добродзій Т. В. Метод усереднення в задачах керування періодичними системами. // Нелінійні коливання. — 2010. — Т. 13, №2. — С. 147–154.
12. Станжицкий А. Н., Добродзий Т. В. Исследование задач оптимального управления на полуоси методом усреднения. // Дифференциальные уравнения. — 2011. — Т. 47, №2. — С. 264–277.

Институт инновационного и последипломного образования, Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова, ул. Дворянская, 2, Одесса, 65026, Украина.

Поступила 01.10.2014

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, №1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.9

НОВЫЙ ДВУХЭТАПНЫЙ ПРОКСИМАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О РАВНОВЕСИИ

Я. И. Ведель, В. В. Семенов

Резюме. В работе предложен новый итерационный двухэтапный проксимальный метод решения задачи равновесного программирования в гильбертовом пространстве. Метод является развитием модификации Л. Д. Попова схемы Эрроу-Гурвица поиска седловых точек выпукло-вогнутых функций. Анализ сходимости метода проведен в предположении о существовании решения и при условиях псевдомонотонности и липшицевости бифункции.

Ключевые слова: задача о равновесии, двухэтапный проксимальный метод, бифункция, псевдомонотонность, липшицевость, сходимость.

1. Введение

Популярным направлением современного прикладного нелинейного анализа является исследование задач равновесного программирования (неравенств Ки Фаня, задач о равновесии) вида

$$\text{найти } \; x \in C: \; F(x,y) \geq 0 \;\; \forall\, y \in C, \tag{1}$$

где C — непустое подмножество гильбертова пространства H, $F : C \times C \to \mathbb{R}$ — бифункция. Задача (1) — удобная общая форма записи различных задач, возникающих в математической физике, исследовании операций и оптимизации [1, 2, 3, 4, 5]. Приведем насколько типичных формулировок.

(1) Если $F(x,y) = f(y) - f(x)$, где $f : C \to \mathbb{R}$, то задача (1) является задачей условной минимизации $f \to \min_C$.

(2) Если $F(x,y) = (Ax, y-x)$, где $A : C \to H$, то задача (1) сводится к классическому вариационному неравенству

$$\text{найти } \; x \in C: \; (Ax, y-x) \geq 0 \;\; \forall\, y \in C. \tag{2}$$

(3) Пусть P, Q — выпуклые подмножества H, $C = P \times Q$, $L : C \to \mathbb{R}$ — выпукло-вогнутая функция. Точку $(\bar{x}, \bar{p}) \in C$ называют седловой точкой функции L, если

$$L(\bar{x}, p) \leq L(\bar{x}, \bar{p}) \leq L(x, \bar{p}) \;\; \forall\, x \in P \; \forall\, p \in Q. \tag{3}$$

Положим $F(v,w) = L(z,p) - L(x,y)$, где $v = (z,y)$, $w = (x,p)$. Тогда задача поиска седловой точки (3) равносильна задаче (1).

(4) Пусть I — конечное множество индексов. Для каждого $i \in I$ заданы множество C_i и функция $f_i : C \to \mathbb{R}$, где $C = \prod_{i \in I} C_i$. Для $x = (x_i)_{i \in I} \in C$ обозначим $x^i = (x_j)_{j \in I, j \neq i}$. Точку $\bar{x} = (\bar{x}_i)_{i \in I}$ называют равновесием Нэша, если для всех $i \in I$ выполняются неравенства

$$f_i(\bar{x}) \leq f_i(\bar{x}^i, y_i) \quad \forall\, y_i \in C_i.$$

Определим функцию $F : C \times C \to \mathbb{R}$ следующим образом

$$F(x, y) = \sum_{i \in I} \left(f_i(x^i, y_i) - f_i(x) \right).$$

Точка $\bar{x} \in C$ является равновесием Нэша тогда и только тогда, когда она является решением задачи (1).

Алгоритмам решения равновесных и близких задач посвящено много работ, например, [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]. В методах, рассмотренных в работах [5, 6, 7, 8], на каждом шаге решаются вспомогательные равновесные задачи с сильно монотонными бифункциями. Отметим работы [10, 19, 20, 21], где предложены и исследованы итерационные алгоритмы, в которых на каждом шаге необходимо решать вспомогательные сильно выпуклые задачи минимизации.

В данной работе предложен новый итерационный двухэтапный проксимальный метод решения задачи равновесного программирования в гильбертовом пространстве. Метод является развитием модификации Л. Д. Попова [22, 23] схемы Эрроу-Гурвица поиска седловых точек выпукло-вогнутых функций. Анализ сходимости метода проведен в предположении о существовании решения и при условиях псевдомонотонности и липшицевости бифункции.

2. Постановка задачи и алгоритм

Всюду далее H — действительное гильбертово пространство со скалярным произведением $(\cdot, \cdot)$ и порожденной нормой $\|\cdot\|$. Сильную и слабую сходимость в H последовательности (x_n) к x обозначим $\to$ и $\rightharpoonup$, соответственно.

Для непустого выпуклого замкнутого множества $C \subseteq H$ и бифункции $F : C \times C \to \mathbb{R}$ рассмотрим задачу о равновесии:

$$\text{найти} \quad x \in C : \quad F(x, y) \geq 0 \quad \forall\, y \in C. \tag{4}$$

Множество решений задачи (4) обозначим S.

Будем предполагать выполненными следующие условия:

(A1) $F(x, x) = 0$ для всех $x \in C$;

(A2) для всех x, $y \in C$ из $F(x, y) \geq 0$ следует $F(y, x) \leq 0$ (псевдомонотонность);

(A3) для всех $x \in C$ функция $F(x, \cdot)$ полунепрерывна снизу и выпукла на C;

(A4) для всех $y \in C$ функция $F(\cdot, y)$ слабо полунепрерывна сверху на C;

(A5) для всех x, y, $z \in C$ имеет место

$$F(x,y) \le F(x,z) + F(z,y) + a\|x-z\|^2 + b\|z-y\|^2,$$

где a, b — положительные константы (липшицевость);

(A6) для ограниченных последовательностей (x_n), (y_n) из C имеет место

$$\|x_n - y_n\| \to 0 \;\Rightarrow\; F(x_n, y_n) \to 0.$$

При выполнении условий (A1)–(A4) имеем

$$x \in S \;\Leftrightarrow\; x \in C:\; f(y,x) \le 0 \;\; \forall\, y \in C.$$

В частности, множество S — выпукое и замкнутое.

Далее будем предполагать, что $S \neq \emptyset$.

Замечание 1. Условие (A5) типа липшицевости введено Mastroeni в [3]. Например, бифункция $F(x,y) = (Ax, y-x)$ с липшицевым оператором $A: C \to H$ удовлетворяет (A5). Действительно,

$$\begin{aligned} F(x,y) - F(x,z) - F(z,y) &= (Ax, y-x) - (Ax, z-x) - (Az, y-z) = \\ &= (Ax - Az, y-z) \le \|Ax - Az\|\,\|y-z\| \le L\|x-z\|\,\|y-z\| \le \\ &\le \frac{L}{2}\|x-z\|^2 + \frac{L}{2}\|y-z\|^2. \end{aligned}$$

Замечание 2. Условию (A6) удовлетворяет бифункция

$$F(x,y) = (Ax, y-x)$$

с липшицевым оператором $A: C \to H$.

Пусть $g: H \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ — собственная выпуклая полунепрерывная снизу функция. Напомним, что проксимальным оператором [24], ассоциированным с функцией g, называют оператор

$$H \ni x \mapsto \mathtt{prox}_g x = \operatorname{argmin}_{y \in \operatorname{dom} g}\left(g(y) + \frac{1}{2}\|y-x\|^2\right) \in \operatorname{dom} g.$$

Оператор $\mathtt{prox}_g$ — твердо нерастягивающий (firmly nonexpansive) и

$$g(y) - g(z) + (z-x, y-z) \ge 0 \;\; \forall\, y \in \operatorname{dom} g \;\Leftrightarrow\; z = \mathtt{prox}_g x.$$

Для приближенного решения задачи (4) предлагаем следующий итерационный

Алгоритм 1. Для x_1, $y_1 \in C$ генерируем последовательность элементов x_n, $y_n \in C$ при помощи итерационной схемы

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n, \cdot)} x_n, \\ y_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n, \cdot)} x_{n+1}, \end{cases}$$

где $\lambda > 0$.

Замечание 3. Если $F(x,y) = (Ax, y-x)$, то алгоритм 1 принимает вид:

$$\begin{cases} x_1 \in C,\; y_1 \in C, \\ x_{n+1} = P_C(x_n - \lambda A y_n), \\ y_{n+1} = P_C(x_{n+1} - \lambda A y_n), \end{cases}$$

где P_C — оператор метрического проектирования на множество C.

Частный случай схемы из замечания 3 предложен российским математиком Л. Д. Поповым [22] для поиска седловых точек выпукло-вогнутых функций, определенных в конечномерном евклидовом пространстве. В недавних работах Ю. В. Малицкий и В. В. Семенов [23, 25] доказали сходимость этого алгоритма для неравенств с монотонными и липшицевыми операторами, действующими в бесконечномерном гильбертовом пространстве, а также предложили несколько его модификаций.

Относительно обоснования итерационного алгоритма 1 прежде всего заметим, что при выполнении для некоторого номера $n \in \mathbb{N}$ равенств

$$x_{n+1} = x_n = y_n \tag{5}$$

имеет место включение $y_n \in S$ и условие стационарности: $y_k = x_k = y_n$ для всех $k \geq n$. Действительно, равенство

$$x_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n, \cdot)} x_n$$

означает

$$F(y_n, y) - F(y_n, x_{n+1}) + \frac{(x_{n+1} - x_n, y - x_{n+1})}{\lambda} \geq 0 \ \ \forall y \in C.$$

Из (5) следует

$$F(y_n, y) \geq 0 \ \ \forall y \in C,$$

то есть $y_n \in S$.

Учитывая это соображение практическому варианту алгоритма 1 можно придать следующий вид.

Алгоритм 2. Задаем $x_1 \in C$, $y_1 \in C$, $\lambda > 0$ и $\varepsilon > 0$.

1. Для x_n и y_n вычисляем

$$x_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n, \cdot)} x_n.$$

2. Если $\max\{\|x_{n+1} - x_n\|, \|y_n - x_n\|\} \leq \varepsilon$, то СТОП, иначе вычисляем

$$y_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n, \cdot)} x_{n+1}.$$

3. Полагаем $n := n + 1$ и переходим на шаг 1.

Далее будем предполагать, что для всех номеров $n \in \mathbb{N}$ условие (5) не имеет места.

Для доказательства сходимости алгоритма нам потребуются следующие факты.

Лемма 1. *Пусть неотрицательные последовательности* (a_n), (b_n) *таковы, что*

$$a_{n+1} \leq a_n - b_n.$$

Тогда существует предел $\lim_{n\to\infty} a_n \in \mathbb{R}$ *и* $\sum_{n=1}^{\infty} b_n < +\infty$.

Лемма 2 (Z. Opial, [26]). *Пусть последовательность (x_n) элементов гильбертова пространства H слабо сходится к элементу $x \in H$. Тогда для всех $y \in H \setminus \{x\}$ имеем*

$$\liminf_{n\to\infty} \|x_n - x\| < \liminf_{n\to\infty} \|x_n - y\|.$$

3. Основное неравенство

Анализ сходимости алгоритма начнем с доказательства важного неравенства для последовательностй (x_n) и (y_n), порождаемых алгоритмом 1.

Имеет место

Лемма 3. *Для порожденных алгоритмом 1 последовательностей (x_n), (y_n) и элемента $z \in S$ выполняется неравенство*

$$\|x_{n+1} - z\|^2 \le \|x_n - z\|^2 - (1 - 2\lambda b)\|x_{n+1} - y_n\|^2 - \\ - (1 - 4\lambda a)\|y_n - x_n\|^2 + 4\lambda a \|x_n - y_{n-1}\|^2. \quad (6)$$

Доказательство. Имеем

$$\|x_{n+1} - z\|^2 = \|x_n - z\|^2 - \|x_n - x_{n+1}\|^2 + 2(x_{n+1} - x_n, x_{n+1} - z) = \\ = \|x_n - z\|^2 - \|x_n - y_n\|^2 - \|y_n - x_{n+1}\|^2 - \\ - 2(x_n - y_n, y_n - x_{n+1}) + 2(x_{n+1} - x_n, x_{n+1} - z). \quad (7)$$

Из определения точек x_{n+1} и y_n следует

$$\lambda F(y_n, z) - \lambda F(y_n, x_{n+1}) \ge (x_{n+1} - x_n, x_{n+1} - z), \quad (8)$$

$$\lambda F(y_{n-1}, x_{n+1}) - \lambda F(y_{n-1}, y_n) \ge -(x_n - y_n, y_n - x_{n+1}). \quad (9)$$

Использовав неравенства (8), (9) для оценки скалярных произведений в (7), получаем

$$\|x_{n+1} - z\|^2 \le \|x_n - z\|^2 - \|x_n - y_n\|^2 - \|y_n - x_{n+1}\|^2 + \\ + 2\lambda\{F(y_n, z) - F(y_n, x_{n+1}) + F(y_{n-1}, x_{n+1}) - F(y_{n-1}, y_n)\}. \quad (10)$$

Из псевдомонотонности бифункции F и включения $z \in S$ следует

$$F(y_n, z) \le 0,$$

а липшицевость F гарантирует выполнение неравенства

$$-F(y_n, x_{n+1}) + F(y_{n-1}, x_{n+1}) - F(y_{n-1}, y_n) \le \\ \le a\|y_{n-1} - y_n\|^2 + b\|y_n - x_{n+1}\|^2.$$

Использовав вышеприведенные оценки в (10), получаем

$$\|x_{n+1} - z\|^2 \le \|x_n - z\|^2 - \|x_n - y_n\|^2 - \|y_n - x_{n+1}\|^2 + \\ + 2\lambda a\|y_{n-1} - y_n\|^2 + 2\lambda b\|y_n - x_{n+1}\|^2. \quad (11)$$

Член $\|y_{n-1} - y_n\|^2$ оценим следующим образом

$$\|y_{n-1} - y_n\|^2 \le 2\|y_{n-1} - x_n\|^2 + 2\|y_n - x_n\|^2.$$

Учтя эту оценку в (11), приходим к неравенству

$$\|x_{n+1}-z\|^2 \le \|x_n-z\|^2 - \|x_n-y_n\|^2 - \|y_n-x_{n+1}\|^2 + \\ + 4\lambda a\,\|y_{n-1}-x_n\|^2 + 4\lambda a\,\|y_n-x_n\|^2 + 2\lambda b\,\|y_n-x_{n+1}\|^2,$$

то есть к неравенству (6). □

4. Слабая сходимость

Перейдем непосредственно к доказательству сходимости алгоритма.

Пусть $z \in S$. Положим

$$a_n = \|x_n-z\|^2 + 4\lambda a\,\|y_{n-1}-x_n\|^2,$$
$$b_n = (1-4\lambda a)\,\|y_n-x_n\|^2 + (1-4\lambda a-2\lambda b)\,\|y_n-x_{n+1}\|^2.$$

Тогда (6) принимает вид

$$a_{n+1} \le a_n - b_n.$$

Потребуем выполнения условия

$$0 < \lambda < \frac{1}{2(2a+b)}.$$

Тогда из леммы 1 можем сделать вывод, что существует предел

$$\lim_{n\to\infty}\left(\|x_n-z\|^2 + 4\lambda a\,\|y_{n-1}-x_n\|^2\right)$$

и

$$\lim_{n\to\infty}\left((1-4\lambda a)\,\|y_n-x_n\|^2 + (1-4\lambda a-2\lambda b)\,\|y_n-x_{n+1}\|^2\right) = 0.$$

Откуда получаем

$$\lim_{n\to\infty}\|y_n-x_n\| = \lim_{n\to\infty}\|y_n-x_{n+1}\| = \lim_{n\to\infty}\|x_n-x_{n+1}\| = 0 \qquad (12)$$

и сходимость числовой последовательности $(\|x_n-z\|)$ для всех $z \in S$. В частности, последовательности (x_n), (y_n) ограничены.

Рассмотрим подпоследовательность (x_{n_k}), слабо сходящуюся к некоторой точке $\bar z \in C$. Тогда из (12) следует, что $y_{n_k} \rightharpoonup \bar z$ и . Покажем, что $\bar z \in S$. Имеем

$$F(y_n,y) \ge F(y_n,x_{n+1}) + \frac{(x_{n+1}-x_n,\,x_{n+1}-y)}{\lambda} \quad \forall y \in C. \qquad (13)$$

Совершив предельный переход в (13) с учетом (12) и условий (A4), (A6), получим

$$F(\bar z,y) \ge \limsup_{k\to\infty} F(y_{n_k},y) \ge \\ \ge \lim_{k\to\infty}\left\{F(y_{n_k},x_{n_k+1}) + \frac{(x_{n_k+1}-x_{n_k},\,x_{n_k+1}-y)}{\lambda}\right\} = 0 \quad \forall y \in C,$$

то есть $\bar z \in S$.

Покажем теперь, что $x_n \rightharpoonup \bar z$. Тогда из (12) следует, что и $y_n \rightharpoonup \bar z$. Рассуждаем от противного. Пусть существует подпоследовательность (x_{m_k})

такая, что $x_{m_k} \rightharpoonup \tilde{z}$ и $\tilde{z} \neq \bar{z}$. Ясно, что $\tilde{z} \in S$. Применим дважды лемму 2. Имеем

$$\lim_{n\to\infty} \|x_n - \bar{z}\| = \lim_{k\to\infty} \|x_{n_k} - \bar{z}\| < \lim_{k\to\infty} \|x_{n_k} - \tilde{z}\| = \lim_{n\to\infty} \|x_n - \tilde{z}\| =$$
$$= \lim_{k\to\infty} \|x_{m_k} - \tilde{z}\| < \lim_{k\to\infty} \|x_{m_k} - \bar{z}\| = \lim_{n\to\infty} \|x_n - \bar{z}\|,$$

что невозможно. Следовательно, $x_n \rightharpoonup \bar{z}$.

Таким образом, имеет место

Теорема 1. *Пусть H — гильбертово пространство, $C \subseteq H$ — непустое выпуклое замкнутое множество, для бифункции $F : C \times C \to \mathbb{R}$ выполнены условия (A1)–(A6) и $S \neq \emptyset$. Предположим, что $\lambda \in \left(0, \frac{1}{2(2a+b)}\right)$. Тогда порожденные алгоритмом 1 последовательности (x_n), (y_n) слабо сходятся к решению $\bar{z} \in S$ задачи о равновесии (4), причем $\lim_{n\to\infty} \|x_n - y_n\| = 0$.*

5. Заключительные замечания

В работе был предложен новый итерационный двухэтапный проксимальный метод решения задачи равновесного программирования в гильбертовом пространстве. Метод является развитием модификации Л. Д. Попова [22, 23] схемы Эрроу-Гурвица поиска седловых точек выпукло-вогнутых функций. Анализ сходимости метода проведен в предположении о существовании решения и при условиях псевдомонотонности и липшицевости бифункции.

В одной из ближайших работ будет рассмотрен следующий регуляризованный сильно сходящийся вариант метода

$$\begin{cases} x_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n,\cdot)}\,(1-\alpha_n)\,x_n, \\ y_{n+1} = \mathtt{prox}_{\lambda \cdot F(y_n,\cdot)}\,(1-\alpha_{n+1})\,x_{n+1}, \end{cases}$$

где $\lambda > 0$, (α_n) — бесконечно малая последовательность положительных чисел. Также запланировано изучение варианта метода с использованием метрики Брэгмана вместо евклидовой.

Интересным вопросом является обоснование использования алгоритма 1 в качестве элемента схемы поиска решения задачи о равновесии с априорной информацией, описанной в виде включения в множество неподвижных точек квазинерастягивающего оператора.

Еще одно перспективное направление заключается в развитии идей алгоритма 1 для решения стохастических задач равновесного программирования.

Литература

1. Байокки К., Капело А. Вариационные и квазивариационные неравенства. — Москва: Наука, 1988. — 448 с.
2. Blum E., Oettli W. From optimization and variational inequalities to equilibrium problems // Math. Stud. — 1994, 63. — P. 123–145.

3. Mastroeni G. On auxiliary principle for equilibrium problems / G. Mastroeni // Publicatione del Departimento di Mathematica Dell'Universita di Pisa. — 2000. — 3. — P. 1244–1258.
4. Giannessi F., Maugeri A., Pardalos P. M. Equilibrium Problems: Nonsmooth Optimization and Variational Inequality Models. — New York, Boston, Dordrecht, London, Moscow: Kluwer Academic Publishers, 2004. — 300 p.
5. Combettes P. L., Hirstoaga S. A. Equilibrium Programming in Hilbert Spaces // J. Nonlinear Convex Anal. — 2005, 6. — P. 117–136.
6. Nguyen B., Dang T. T. H. Tikhonov regularization method for system of equilibrium problems in Banach spaces // Український математичний журнал. — 2009. — 61, №8. — С. 1098–1105.
7. Маліцький Ю. В., Семенов В. В. Нові теореми сильної збіжності проксимального методу для задачі рівноважного програмування // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — №3(102). — С. 79–88.
8. Semenov V. V. Strongly Convergent Algorithms for Variational Inequality Problem Over the Set of Solutions the Equilibrium Problems // In: M. Z. Zgurovsky and V. A. Sadovnichiy (eds.), Continuous and Distributed Systems, Solid Mechanics and Its Applications, Volume 211, Springer International Publishing Switzerland, 2014, pp. 131–146.
9. Корпелевич Г. М. Экстраградиентный метод для отыскания седловых точек и других задач // Экономика и математические методы. — 1976. — №4. – С. 747–756.
10. Антипин А. С. Равновесное программирование: проксимальные методы // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. — 1997. — 37, №11. — С. 1327–1339.
11. Semenov V. V. On the Parallel Proximal Decomposition Method for Solving the Problems of Convex Optimization // Journal of Automation and Information Sciences. — 2010. — V. 42, №4. — P. 14–18.
12. Денисов С. В. Параллельная схема декомпозиции для поиска седловой точки и равновесия Нэша // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — №3(102). — С. 40–48.
13. Денисов С. В., Семенов В. В. Проксимальний алгоритм для дворівневих варіаційних нерівностей: сильна збіжність // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2011. — №3(106). — С. 27–32.
14. Войтова Т. А., Денисов С. В., Семенов В. В. Альтернуючий проксимальний алгоритм для задачі дворівневої опуклої мінімізації // Доповіді НАН України. — 2012. — №2. — С. 56–62.
15. Семенов В. В. Параллельная декомпозиция вариационных неравенств с монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2012. — №2(108). — С. 53–58.
16. Семенов В. В. Параллельная декомпозиция операторных включений с максимальными монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2013. — №2(112). — С. 155–160.
17. Semenov V. V. Hybrid Splitting Methods for the System of Operator Inclusions with Monotone Operators // Cybernetics and Systems Analysis. — 2014. — V. 50, №5. — P. 741–749.
18. Semenov V. V. A Strongly Convergent Splitting Method for Systems of Operator Inclusions with Monotone Operators // Journal of Automation and Information Sciences. — 2014. — V. 46, №5. — P. 45–56.

19. Tran D. Q., Muu L. D., Nguyen V. H. Extragradient algorithms extended to solving equilibrium problems // Optimization. — 2008. — 57(6). — P. 749–776.
20. Войтова Т. А., Денисов С. В., Семенов В. В. Сильно збіжний модифікований варіант методу Корпелевич для задач рівноважного програмування // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2011. — №1(104). — С. 10–23.
21. Lyashko S. I., Semenov V. V., Voitova T. A. Low-cost modification of Korpelevich's methods for monotone equilibrium problems // Cybernetics and Systems Analysis. — 2011. — V. 47, №4. — P. 631–639.
22. Попов Л.Д. Модификация метода Эрроу-Гурвица поиска седловых точек // Математические заметки. — 1980. — Т. 28, №5. — С. 777–784.
23. Malitsky Yu. V., Semenov V. V. An extragradient algorithm for monotone variational inequalities // Cybernetics and Systems Analysis. — 2014. — V. 50, №2. — P. 271–277.
24. Bauschke H. H., Combettes P. L. Convex Analysis and Monotone Operator Theory in Hilbert Spaces. — Springer, 2011. — 408 + XVI p.
25. Malitsky Yu. V., Semenov V. V. A hybrid method without extrapolation step for solving variational inequality problems // Journal of Global Optimization. — 2015. — V. 61. — Issue 1. — P. 193–202.
26. Opial Z. Weak convergence of the sequence of successive approximations for nonexpansive mappings // Bull. Amer. Math. Soc. — 1967. — 73. — P. 591–597.

Факультет кибернетики, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, ул. Владимирская, 64, Киев, 01601, Украина, e-mail: yandx@ukr.net

Факультет кибернетики, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, ул. Владимирская, 64, Киев, 01601, Украина, e-mail: semenov.volodya@gmail.com

Поступила 19.10.2014

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, №1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 519.85

РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАЛЕЖНИХ ВІД ЧАСУ ЗАДАЧ ПОШУКУ НАЙКОРОТОГО ШЛЯХУ

А. І. Павленко

Резюме. Розглядаються алгоритми для планування маршрутів в транспортних мережах, які розроблені останнім часом. Подано огляд підходів до моделювання розкладу у динамічних графах. Описані специфічні підходи розв'язання залежної від часу задачі пошуку найкоротшого шляху з врахуванням розкладу громадського транспорту.

Вступ

Пошук найкоротших шляхів у динамічних графах є практичною задачею із багатьох сфер людської діяльності: маршрутизація дорожніх мереж, планування подорожей, розкладів залізничних сполучень тощо. Ключовим компонентом сучасних систем маршрутизації (наприклад Google Maps, SkyScanner, GPS навігатори тощо) є алгоритми, які розраховують маршрути подорожей в залежності від пунктів відправки і прибуття, часу подорожі, користувацьких умов тощо. Такі алгоритми повинні бути швидкими і забезпечувати оптимальні чи близькі до них розв'язки для будь-якого запиту користувача.

Транспортні мережі зазвичай є зазвичай *динамічними* — з непередбачуваними затримками, заторами тощо. Цей факт значно ускладнює проблеми пошуку найкоротших шляхів, тому багато сучасних методів мають два етапи — процедуру *попередньої обробки* вхідних статичних даних для пришвидшення роботи алгоритму (наприклад, аналіз топології графу, пошук ключових транзитних вузлів, пропускна спроможність автошляхів тощо) і власне процедуру запиту — пошук оптимального шляху відповідно до параметрів моделі в конкретний час з врахуванням умов користувача (наприклад, з врахуванням інформації про поточну швидкість руху на автошляху, затримки рейсу тощо). Алгоритми, які застосовуються у реальних системах масового обслуговування, повинні працювати в режимі реального часу з прийнятною ресурсоємністю в масштабах великих регіонів.

В реальних транспортних мережах найкращі шляхи зазвичай залежать від часу відправлення. Наприклад, деякі автошляхи постійно перевантажені у години пік, а потяги і автобуси відправляються з різною частотою протягом дня. Якщо необхідно прибути у деякий пункт якомога раніше з врахуванням часу відправлення (або, симетрична задача — якомога пізніше відправитись щоб прибути до деякого зазначеного часу), то говорять про залежну від часу *задачу пошуку найкоротшого шляху* (Time-Dependent

Shortest Path Problem), для якої характерне призначення функцій часу в якості функцій вартості для дуг.

В загальному випадку транспортна мережа моделюється як зважений орієнтований граф (мультиграф), ваги дуг якого відображають параметри (час подорожі, відстань, ціна тощо), які необхідно оптимізувати. Дане дослідження присвячене підходам розв'язання залежної від часу задачі пошуку найкоротшого шляху між двома пунктами з врахуванням розкладу. Така постановка притаманна задачі пошуку оптимального маршруту між заданими пунктами мережами громадського транспорту. Типові запити у таких задачах — пошук найкращого часу відправлення при мінімізації загального часу подорожі.

1. Формальна модель залежної від часу задачі пошуку найкоротшого шляху

Дано орієнтований зважений граф $G = (V, A)$, де $V = \{v_1, ..., v_n\}$ — множина n вершин; A – множина дуг, початкова $s \in V$ і кінцева вершини $d \in V$, t_0 — час відправлення з вершини s. Кожній дузі $a = (i, j)$ відповідає вартість $c_{ij}(t)$, де t — час відправлення з пункту i. Вартість може вимірюватись у матеріальних витратах, тривалості, відстані або будь-якій іншій мірі ресурсних витрат. Довжиною шляху є сума вартостей всіх його дуг. Найменший шлях між двома пунктами позначається $g(i, j)$. Метою задачі пошуку найкоротшого шляху є знаходження найкоротшого шляху (або найдешевшого, найшвидшого в залежності від вимірюваних ресурсів) між однією початковою вершиною і однією цільовою (задача *one-to-one*), між однією початковою і усіма іншими вершинами (задача *one-to-all*), між усіма вершинами і однією цільовою (*all-to-one*). Дане дослідження концентрується на задачі *one-to-one*.

Загалом залежна від часу задача пошуку найкоротших шляхів не є новою. У 1966 році Кук і Хелсі [1] сформулювали її і запропонували методи розв'язання на основі принципів оптимальності Белмана [2]. Для спрощення питання існування і для зручності обчислення було запропоновано ввести дискретну часову множину $S = \{t_0, t_0 + 1, t_0 + 2, \ldots, t_0 + T\}$, причому $c_{ij}(t)$ може приймати будь-яке додатне ціле значення для $t \in S = \{t_0, t_0 + 1, t_0 + 2, \ldots, t_0 + T\}$, $i \neq j$. Якщо дуги (i, j) не існує, то $c_{ij}(t) = \infty$. Нехай $E_i(t)$ — множина усіх шляхів, у яких виконується вихід з пункту i в час $t \in S$ і досягається d за скінченну вартість (час) після скінченної кількості кроків. Оскільки вартість для кожного шляху $E_i(t)$ додатна, то серед них можна знайти шлях з мінімальною вартістю. Для $t \in S$ автори визначили $f_i(t)$ — мінімальна вартість для шляху з $E_i(t)$, $i = 1, 2, \ldots, d-1$, $f_d(t) = 0$, де мінімальна вартість $f_i(t)$ досягається принаймні одним з шляхів з i в d за скінченну кількість кроків. Використовуючи принцип оптимальності [3] вони запропонували подати залежну від часу задачу пошуку шляху $f_i(t) = \min\limits_{j \neq i}(c_{ij}(t) + f_j(t + c_{ij}(t))), \quad i = 1, 2, \ldots, d-1$, $f_d(t) = 0$.

Для розв'язання задачі Кук і Хелсі запропонували модифікацію схеми ітерацій Белмана для знаходження найкоротшого шляху між двома вершинами за скінчену кількість ітерацій. Була визначена максимальна межа T, розрахувавши прямий перехід з i в d — $c_{id}(t_0)$. Якщо прямого переходу немає, то шукається шлях з проміжними вершинами для визначення верхньої оцінки. За допомогою такої оцінки усі переходи, більші за верхню межу, не приймаються до розгляду.

Дрейфус [5] припустив, що загальним алгоритмом Дейкстри можна розв'язувати динамічну задачу, поставлену Куком і Хелсі, так само ефективно, як і загальні статичні задачі. У [1] було доведено, що це можливо лише якщо мережа володіє властивостями FIFO.

Властивості FIFO і узгодженості вартості. Динамічний граф є графом FIFO, якщо кожна дуга графу задовольняє властивості FIFO. Дузі (i, j) притаманна властивість FIFO (*first in first out*), якщо $t + c_{ij}(t) \leq (t + k) + c_{ij}(t + k)$, $\forall t, k \geq 1$, t, k — моменти часу. Практично це означає, що якщо транспортний засіб відправляється з деякого пункту пізніше, він не може прибути до пункту призначення раніше, ніж транспортний засіб, який вирушив з початкового пункту вчасно. Властивість узгодження вартості аналогічна FIFO для іншого виду ресурсів, тобто дуга (i, j) вважається узгодженою за вартістю, якщо при виході з пункту i вартість шляху менша, ніж при виході з пункту j.

2. Планування оптимального маршруту громадським транспортом.

Постановка задачі. Для задачі планування оптимального маршруту в якості вхідних даних зазвичай є *розклад руху* транспорту. Він подається множиною *зупинок* (автобусні зупинки, залізничні платформи, аеропорти тощо), множиною *маршрутів слідування* (автобусні, трамвайні, залізничні маршрути тощо) [6]. Маршрут слідування — послідовність зупинок, які повинен відвідати транспортний засіб в конкретний час, — являє собою множину елементарних сполучень. Елементарне *сполучення* задається двома зупинками, між якими курсує транспортний засіб, а також час відправлення і прибуття.

Ключовою відмінністю мереж громадського транспорту від автомобільних є невід'ємна наявність залежності від часу, адже деякі сегменти мережі стають досяжними тільки в зазначені моменти часу. Тому початковою задачею при розв'язанні залежних від часу задач пошуку найкоротших шляхів є подання розкладу у графі. Існують два основні підходи для подання часу у мережах — time-expanded (розширений за часом) і time-dependent (залежний від часу).

Проста розширена за часом модель подання розкладу у графі (time-expanded model). Підхід ґрунтується на тому факті, що розклад складається з *залежних від часу подій* (час відправлення транспорту), які відбуваються в дискретні моменти часу. Ідея полягає у побудові *просторово-часового графу* (space-time graph) або *графу подій* (event graph), який «розгортає» граф у часі. Грубо кажучи, для кожної події розкладу

створюється вершина, а для подання елементарних сполучень або очікування на станціях використовуються дуги. Таким чином, кожному сполученню $conn \in CONN$ ($CONN$ — множина сполучень) відповідає дуга і дві вершини — пункти відправлення $u_{dep}(conn)$ і прибуття $u_{arr}(conn)$. В залежності від критерію оптимізації, дугам присвоюються деякі фіксовані ваги. Вершинам завжди неявно відповідають деякі значення часу $\tau(u)$. В нашому випадку час вершини відправлення задається часом відправлення відповідного сполучення $\tau_{dep}(conn)$, а час вершини прибуття задається часом $\tau_{arr}(conn)$. Кожній вершині відповідає зупинка $p(u)$, причому кожній зупинці можуть відповідати кілька вершин.

Для кожного сполучення $conn \in CONN$ в модель додається дуга $(u_{dep}(conn), u_{arr}(conn))$ між вершинами відправлення і прибуття цього сполучення. Для здійснення пересадок на зупинках до моделі додаються (незалежно для кожної зупинки $p \in STOPS$, де $STOPS$ — множина зупинок) дуги, призначені для неявного забезпечення часу для пересадки. В тому випадку, коли розклад є періодичним, для кожної зупинки додається дуга (u, v) з найпізнішої до найранішої вершини зупинки, дозволяючи переходи з одного періоду розкладу до іншого. Звичайно, в такому випадку граф стає циклічним.

Реалістична розширена за часом модель подання розкладу у графі (time-expanded model). В реалістичній моделі для моделювання пересадок вводяться транзитні вузли $u_{tr}(conn)$ причому $p(u_{tr}(conn)) = p_{dep}(conn)$. Для кожної події відправлення створюється одна *пересадочна вершина*, з'єднана з відповідною вершиною відправлення $u_{dep}(conn)$. Вага дуги, що відображує сполучення між пересадочною вершиною і вершиною відправлення, рівна нулю. Для забезпечення мінімального часу пересадки на деякій станції, між кожною вершиною прибуття u і вершиною v (яка також відповідає зупинці p) з відповідним найменшим часом також додається дуга, причому $\tau(u) + \tau_{transfer}(p) \leq \tau(v)$, де $\tau_{transfer}(p)$ — час пересадки.

Для забезпечення можливості залишатися в тому ж потязі на проміжних зупинках створюється додаткова дуга, яка з'єднує вершину прибуття і відповідну вершину відправлення, які відповідають маршруту одного потягу.

Основною перевагою розширеного за часом графу є його незалежність за часом, тобто дуги мають фіксовану вагу. Ця перевага робить можливим застосування класичних методів пошуку найкоротших шляхів.

Проста залежна від часу модель подання розкладу у графі (time-dependent model).

На відміну від розширеного за часом графу, залежні від часу графи мають значно менші розміри (порядку кількості зупинок і маршрутів розкладу). Даний підхід використовує спеціальні залежні від часу функції тривалості подорожі (time-dependent travel time functions) в якості ваг дуг.

Ключова ідея даного підходу — комбінація кількох елементарних сполучень в єдину дугу за допомогою *залежних від часу функцій тривалості подорожі.* Введемо простір функцій F, який складається з функцій часу подорожей у вигляді: $f : \Pi \to Z_{\geq 0}$. Кожна функція $f \in F$ співставляє

(переводить) *час відправлення* у *час подорожі* (або вартість). Час відправлення обирається з інтервалу Π — період операції у розкладі, час подорожі може приймати довільні невід'ємні цілі числа (з огляду на прибуття після півночі).

Розглянемо просту залежну від часу модель мережі. Дано розклад і відповідна множина елементарних сполучень $CONN$. Модель будує направлений граф $G = (V, A)$ створюючи вершину u_p, яка відповідає зупинці $p \in STOPS$. До множини A додаються дуги (p_1, p_2) тільки в тому випадку, якщо існує елементарне сполучення з p_1 в p_2, тобто $p_{dep}(conn) = p_1$ і $p_{arr}(conn) = p_2$. Вартості дуг визначаються в термінах функцій часу подорожі, тобто $c : A \to F$, де F — простір функцій. Отже, кожна дуга $(p_1, p_2) \in A$ містить саме ті точки сполучення, які відповідають елементарним сполученням з p_1 в p_2.

Реалістична залежна від часу модель подання розкладу у графі. Модель ґрунтується на тому судженні, що пересадки на одному і тому ж рейсі не бувають оптимальними. Таким чином, модель групує елементарні сполучення по рейсу. Нехай $\Re_p$ — множина маршрутів, що проходять через зупинку $p \in STOPS$. В моделі створюються вершини зупинок $p \in V$ (як і раніше), але додатково створюються вершини маршрутів r_p для кожної вершини маршруту з $\Re_p$.

Для кожного маршруту (рейсу) $r \in \Re$ розкладу і двох послідовних задіяних по маршруту зупинок $p_i, p_j \in STOPS$ створюється залежна від часу дуга маршруту $(r_{p_i}, r_{p_j}) \in A$. Залежна від часу функція часу подорожі створеної дуги містить точку сполучення, причому для кожного її елементарного сполучення $conn \in CONN$ дійсні твердження $p_{dep}(conn)=p_i$, $p_{arr}(conn) = p_j$, $r(conn) = r$. Для здійснення пересадок додаються дуги пересадок, які поєднують вершини зупинок і усі відповідні вершини маршруту. Отже, додаються дуги (p, r_p) і (r_p, p) для кожної зупинки $r_p \in \Re_p$. Модель враховує мінімальний час пересадки встановлюючи $c(p, r_p) = \tau_{transfer}(p)$ для усіх дуг, що ведуть з вершини зупинки до вершинам маршруту, де $\tau_{transfer}(p)$ — мінімальний час пересадки на зупинці p. Відповідно, $c(r_p, p) = 0$для усіх дуг, що ведуть з вершин маршруту до вершини зупинки.

Багатокритеріальні задачі. Інколи необхідно розширити функцію вартості кількома критеріями. Наприклад, деякі типи транспорту не можуть використовувати деякі сегменти транспортної мережі. Таким чином, можна адаптувати фазу попередньої обробки таким чином, щоб відповідні дуги заборонялись на етапі запиту, або виконувати оновлення метрик для кожного типу транспорту.

Пошуковий запит може бути гнучкішим. Наприклад, турист може захотіти зробити подорож трохи довшою, але з більшою кількістю туристичних пунктів. В такому випадку мають справу з багатокритеріальною задачею. В такому випадку шляхи порівнюються з врахуванням усіх критеріїв, а метою є пошук множини Парето, тобто максимальну множину непорівнюваних шляхів. Розв'язок такої задачі було запропоновано у [7] алгоритмом багатокритеріальної установки міток (Multicriteria Label-Setting — MLS),

який розширює алгоритм Дейкстри. Для кожної вершини зберігається набір недомінуючих міток. Кожна мітка є кортежем, де кожний елемент (запис) позначає один критерій оптимізації. Пріоритетна черга формується за значенням міток а не вершин. На кожній ітерації обирається найменша мітка L і скануються інциденті дуги $a = (u, v)$ до вершини u, пов'язаної з L. Виконується додавання вартості a до L і потім об'єднання L в набір міток вершини v з заміною недомінуючих міток.

Ще одним підходом розв'язання багатокритеріальних задач пошуку найкоротших шляхів є оптимізація лінійної комбінації критеріїв.

3. Специфічні підходи розв'язання залежної від часу задачі пошуку найкоротшого шляху

Алгоритм Дейкстри. Цей алгоритм оперує двома структурами даних — черга пріоритетів вершин Q і мітки часу прибуття $\tau(u)$ для кожної вершини $u \in V$, які ініціалізуються нескінченністю. На першому етапі задається $\tau(s) = \tau$ і s додається до черги Q з міткою τ. Далі з черги пріоритетів обирається вершина u з мінімальною міткою часу прибуття. На наступному кроці алгоритм аналізує усі вихідні дуги $a = (u, v)$. Для кожної дуги створюється мітка орієнтовного часу прибуття $\tau_{tent}(v) = \tau(u) + c(a)$ в вершину v. Якщо $\tau_{tent}(v)$ покращує $\tau(v)$, тобто $\tau_{tent}(v) \leq \tau(v)$, тоді дуга a релаксується: $\tau(v)$ оновлюється значенням $\tau_{tent}(v)$, до черги Q додається вершина v з міткою $\tau_{tent}(v)$. Алгоритм завершується, коли черга пріоритетів порожня.

Час роботи алгоритму Дейкстри визначається структурою даних черги пріоритетів Q.

Для розв'язання задачі пошуку оптимального шляху з урахуванням розкладу громадського транспорту необхідно враховувати той факт, що цільові вершини s і d в розширеному за часом графі невідомі. Вхідними даними є початкова і цільова зупинки p_s і p_d. Вершина s визначається серед усіх вершин відправлення (для простої моделі) або вершин пересадки (для реалістичної моделі) початкової зупинки p_s за критерієм мінімальної мітки $\tau(s) \geq \tau$, де τ — найраніший можливий час відправлення. Час відправлення з вершини s ініціалізується значенням $\tau(s)$. Нажаль, вершина d залишається невідомою до етапу завершення алгоритму. Проте для розширеного за часом алгоритму Дейкстри (Time-Expanded Dijkstra) пошук можна вважати завершеним, якщо буде аналізуватись будь-яка вершина u зупинки p_d. Перша проаналізована вершина серед вершин зупинки p_d відповідає найранішому часу прибуття в p_d.

У випадку залежної від часу моделі графу (time-dependent model), зупинки p_s і p_dявно відповідають вершинам s і d. Орієнтовна мітка $\tau_{tent}(v)$ розраховується за допомогою залежної від часу функції f_a для моменту часу $\tau(u)$ — найранішого часу прибуття в u.

Двонаправлений пошук. Найпростіший підхід поліпшення часу виконання алгоритму Дейкстри в статичному випадку — застосування двонаправленого пошуку, тобто додатковий запуск (обернений) алгоритму Дейкстри з кінцевого пункту до початкового. Алгоритм завершує свою роботу тоді, коли деяка v вершина видаляється з черг обох запусків. На відміну від

статичних задач, двонаправлений пошук алгоритмом Дейкстри потребує значних модифікацій, оскільки час прибуття в кінцевий пункт є невідомим.

Алгоритм A*. Одним із суттєвих критеріїв оцінки ефективності алгоритмів на графах, які працюють в режимі реального часу, є критерій кількості розглянутих вершин до моменту знаходження розв'язку. Простір пошуку алгоритму Дейкстри можна візуалізувати як коло навколо вихідної вершини (Рис. 1). Метою цілеспрямованого алгоритму (goal-target) або пошуку A* є направлення пошуку в сторону цілі.

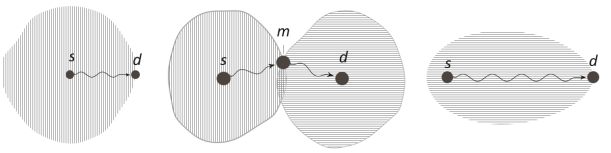


Рис 1. Схематичне зображення простору пошуку алгоритму Дейкстри (зліва), двонаправлений пошук (посередині), A* алгоритму (справа)

Алгоритм A* [8] наслідує ідею алгоритму Дейкстри, але в якості оцінки вершин використовує евристичну функцію $h(v)$ і обирає активну вершину з найменшим $g(v)+h(v)$, де $g(v)$ — найменший шлях від вершини v до цільової вершини. $h(v)$ можна вважати нижньою межею (*lower bound*) вартості (відстані, часу) від вершини v до цільової вершини d. Через це вершини, які розташовані ближче до цільової будуть розглянуті алгоритмом раніше. Вибір евристики $h(v)$ залежить від постановки задачі і не є частиною алгоритму A*, проте він визначає коректність і ефективність розробленого алгоритму A*. Очевидно, що алгоритм Дейкстри є частковим випадком A* з $h \equiv 0$.

У [9] алгоритм A* був застосований для розв'язання залежної від часу задачі пошуку найкоротшого шляху з врахуванням розкладу руху транспорту. Граф подається залежною від часу моделлю. Для кожної вершини u нижня межа до цільової зупинки p_d розраховується запуском оберненого пошуку (з p_d) використовуючи статичні нижні межі залежних від часу функцій в якості значень вартості дуг.

Алгоритм ALT. Для пришвидшення пошуку найкоротших шляхів у великих графах було запропоновано алгоритм ALT (*A*, landmarks, and triangle inequality*) [10]. Ідея алгоритму полягає у виконанні препроцесингу і обробці запитів. Схема алгоритму наведена на Рис. 2.

```
Препроцесинг
  Обрати декілька вершин як орієнтири
  Для кожного орієнтиру
    Розрахувати найкоротші шляхи до всіх вершин
    Зберегти шляхи
Обробка запиту
  Використати A*
  Якщо деяка дуга лежить між поточною вершиною і орієнтиром
    Надати дузі пріоритет при виборі активної
```

Рис 2. Схема алгоритму ALT

На етапі препроцесингу обирається невелика множина вершин в якості орієнтирів (landmarks) і зберігаються відстані між орієнтирами і всіма вершинами у графі. При запиті найкоротшого шляху з s в d застосовується алгоритм A* з використанням нерівності трикутника для розрахунку нижньої межі для відстаней (v, d) для будь-якої вершини v. Тобто, для будь-якого орієнтиру l_i статичної задачі вірно: $g(v, d) \geq g(v, l_i) - g(d, l_i)$. Якість нижніх меж (а отже і ефективність запиту) залежить від вибору орієнтирів на етапі препроцесингу.

Для пошуку найранішого часу прибуття однонаправлений алгоритм ALT був адаптований для розширеної за часом моделі [11] і залежної від часу моделі [12]. В обох випадках вибір орієнтирів і розрахунок відстаней до них виконується на допоміжному графі зупинок: вершини відповідають зупинкам у розкладі, дуга додаються між двома зупинками p_i, p_j, якщо існує пряме сполучення від p_i до p_j без проміжних зупинок. Вартості дуг відображують нижні межі часу подорожі між інцидентними зупинками.

Геометричні контейнери. Іншим цілеспрямованим (goal directed) методом є геометричні контейнери. На етапі попередньої обробки алгоритм розраховує для кожної дуги $a = (u, v) \in A$ мітку $L(a)$, яка являє собою множину вершин V_a, до яких найкоротший шлях з вершини u проходить через дугу a. Замість явного збереження V_a, $L(a)$ узагальнює цю множину використовуючи геометричну інформацію (координати) вершин з V_a. Під час запиту якщо цільова вершина d не належить $L(a)$, з пошуку можна безпечно вилучити розгляд a. У [13] множину V_a апроксимують сектором (з центром в u), який покриває усі вершини V_a. У [14] використовують еліптичні контейнери і випуклі оболонки (convex hull). Недоліком геометричних контейнерів є необхідність істотних обчислень для усіх пар вершин.

Геометричні контейнери були широко протестовані для розширених за часом моделей [13], [14] при розв'язанні задачі пошуку найранішого часу прибуття до цільового пункту.

Arc Flags і SHARC. Підхід Arc Flags (прапори дуг) [15] не використовує геометричні дані. Протягом попередньої обробки граф ділиться на K комірок, які грубо збалансовані (мають однакову кількість вершин) і мають невелику кількість граничних вершин. Кожна дуга зберігає булевий вектор розмірністю K(arc flags), де i-й елемент додатній, якщо дуга належить найкоротшому шляху до деякої вершини з комірки i. Алгоритм

пошуку відсікає дуги, які не містять додатній біт для комірки, яка містить d. Arc Flags для комірки i розраховуються побудовою дерев найкоротших шляхів з кожної граничної вершини (комірки i), виставляючи i-й елемент (флаг) для усіх дуг дерева. Рис. 3 показує схему роботи алгоритму [16]. Вершини і *arc flags* розфарбовані згідно їх комірок.

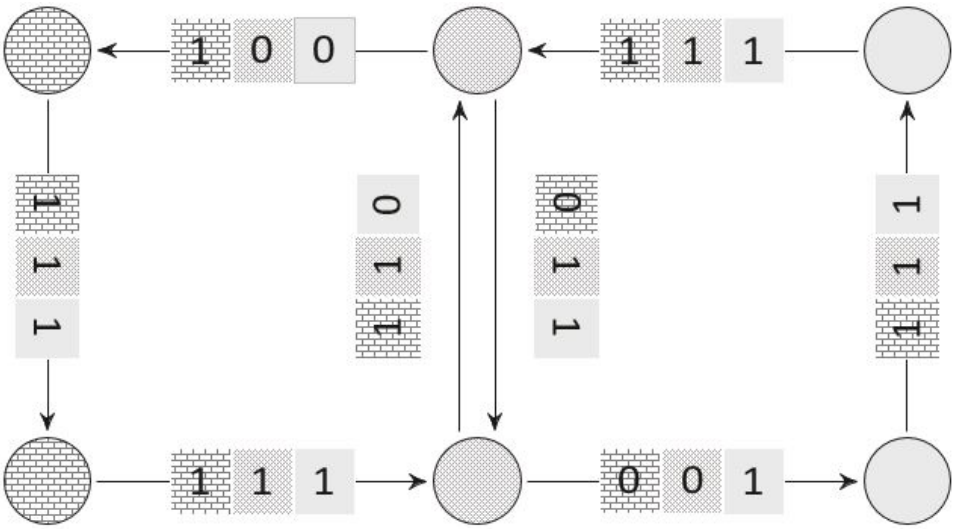


Рис 3. Arc Flags на малих графах

У [11] підхід Arc Flags був адаптований для розширеної за часом моделі. У графі зупинок (побудованому аналогічно підходу ALT) визначаються комірки. На другому кроці для кожної граничної зупинки p комірки C і кожної з її вершин прибуття виконується обернений пошук в розширеній за часом моделі. Було показано, що у мережах громадського транспорту між парами вершин може існувати багато шляхів однакової довжини, що робить вибір вирішальних правил особливо важливим. Arc Flags можна комбінувати з ALT і методом блокування вершин — технікою уникнення аналізу зайвих шляхів графу.

Алгоритм SHARC, який комбінує Arc Flags і мітки найкоротших шляхів, був протестований на залежній від часу моделі для запитів маршрутів найранішого часу прибуття [12]. Окрім того, комбінація Arc Flags і алгоритму багатокритеріальної установки міток (MLS) була використана для розрахунку повних множин Парето відповідно до критеріїв часу прибуття і кількості пересадок для реалістичної залежної від часу моделі [17].

У залежних від часу графах додатній біт виставляється у випадку, якщо дуга зустрічається принаймні один раз в день на найкоротшому шляху до відповідної комірки. З метою покращення продуктивності, використовують різні набори прапорів для різних часових інтервалі дня.

Підходи на основі сепараторів. Планарні графи містять ефективно обчислювальні сепаратори. Хоча дорожні мережі не є планарними, було виявлено, що вони також містять сепаратори. Цей факт використовується методами цього розділу [18].

Суть процедури вершинного сепаратора (Vertex Separators) – бажано невелика підмножина вершин$S \subset V$, при видаленні яких граф G розбивається на декілька (бажано збалансованих) комірок (компонентів). Цей сепаратор може бути використаний для побудови *overlay (багатошарового)* графу G'над S.

Багатошаровий граф даного графу $G = (V, E)$ на підмножині вершин $S \subseteq V$ — граф з множиною вершин S і дугами, які відповідають найкоротшим шляхам в G. Для кожної пари вершин $u, v \in S$, найкоротші $u - v$-шляхи мають однакову довжину у Gі G' [19]. Крім того, у G' бажано мати мінімальну кількість дуг.

У [20] будується граф з «суттєвих» вершин: для кожної пари $u, v \in S$ дуга (u, v) додається до багатошарового графу якщо найкоротший шлях $u-v$ не містить інших вершин. Такий підхід був розвинутий до багаторівневої ієрархії сепараторів $V \supset S_1 \supset S_2 \supset ... \supset S_k$ з kрівнями. Такий багатошаровий граф містить дуги між вершинами-сепараторами на кожному рівні, а також для кожної комірки i-го рівня — дуги між вершинами-сепараторами i-го рівня і вершинами-сепараторами $i - 1$-го рівня (Рис. 4).

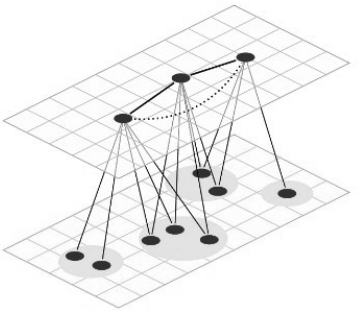


Рис 4. Багаторівневий overlay граф з двома рівнями. Крапками позначено вершинній сепаратори нижнього (помаранчевого) і верхнього (зеленого) рівнів.

Підхід активно досліджується і демонструє відносно добрі результати для пошуку наближених найкоротших шляхів на ненаправлених планарних версіях мереж доріг.

Використання багатошарових графів для пришвидшення запитів був запропонований в контексті планування маршрутів громадським транспортом. У [20] будуються багатошарові графи одного рівня між важливими вузловими станціями у розширеній за часом моделі. Багаторівневі багатошарові графи, які ґрунтуються на вершинних сепараторах, були розроблені в контексті розширених у часі [20].

Скорочення ієрархій (Contraction Hierarchies). Підхід полягає у використанні концепції міток найкоротших шляхів, запропонований у [21]. Мітка найкоротшого шляху (*або скорочуюча дуга*) — це дуга (u, v), яка не обов'язково існує у початковому графі, але визначає найкоротший шлях з u до v в графі G. Метою є розширення графу G мітками таким чином,

щоб запити на великі відстані використовували ці мітки в для пропуску «неважливих» вершин. Метод скорочення ієрархій реалізовує цю ідею повторним виконанням процедури скорочення вершин. Протягом етапу попередньої обробки метод евристично впорядковує вершини згідно їх важливості і потім скорочує в оберненому порядку. Для скорочення вершини v вона тимчасово вилучається з графу G, а між кожною парою її сусідніх вершин u і w додаються мітки найкоротшого шляху в тому випадку, якщо найкоротший шлях з u в w єдиний і містить v. Алгоритм запиту запускає двонаправлений пошук з s в d на скороченому графі G. Методи [22], [23] також використовують подібні ідеї.

Метод скорочення ієрархій був адаптований для реалістичної залежної від часу моделі для обчислення маршрутів найранішого прибуття. Для практичного використання просте застосування алгоритму для графу маршрутів спричиняє створення надто великої кількості міток найкоротшого шляху. Тому скорочення виконується тільки на щільному графі, в якому одній зупинці відповідає одна вершина.

Шаблони пересування. Шаблони пересування — спеціальний підхід пришвидшення роботи алгоритмів мереж громадського транспорту [24]. Він заснований на тому спостереженні, що у багатьох оптимальних подорожей є спільний шаблон пересування, тобто послідовність зупинок пересадок. Ці шаблони можна обчислювати на етапі попередньої обробки для усіх пар зупинок і часу відправлення. Під час запиту будується спеціальний *граф запиту*, який є об'єднанням шаблонів пересування для початкової і цільової зупинок. Дуги графу запиту відображують прямі сполучення між зупинками (без пересадок) і можуть бути швидко оцінені. На наступному кроці може бути застосований алгоритм Дейкстри або алгоритм багатокритеріальної установки міток (MLS) для графу запиту значно меншого розміру.

Якщо визначення шаблонів пересування для усіх пар зупинок на етапі попередньої обробки є надто ресурсоємним, тоді можна застосувати двоетапний підхід. На першому етапі обирається множина важливих транзитних вузлів. Між такими вузлами виконується пошук глобальних шаблонів пересування. Для нетранзитних вершин виконується пошук локальних шаблонів до транзитних вузлів. Нажаль дослідження показали неприйнятний час роботи алгоритму для графів континентального масштабу. Тому було запропоновано на етапі попередньої обробки розглядати шаблони пересування з обмеженою кількістю зупинок (двома). Таким чином етап попередньої обробки транзитної мережі Північної Америки зайняв більше 3000 годин, а запити виконуються в межах 10мс.

Підхід шаблонів пересування використовується в Google Transit [24], [25].

TRANSIT. Підхід маршрутизації транзитних вузлів був адаптований для планування подорожей громадським транспортом [26], [27] — було запропоновано алгоритм TRANSIT.

Підхід маршрутизації транзитних вузлів (TNR) використовує таблицю відстаней підмножини вершин. Протягом етапу попередньої обробки обирається невелика множина $T \subseteq V$ транзитних вузлів і розраховується відстань між вершинами між усіма вершинами попарно підмножини. Для всіх інших вершин $u \in V \backslash T$розраховується відповідна множина вершин $A(u) \subseteq T$, які називаються вершинами доступу (до вершини u). Транзитна вершина $v \in T$ вважається вершиною доступу вершини u, якщо існує найкоротший шлях P з u в графі G так, що вершина v — найперша вершина в P. Алгоритм запиту використовує таблицю відстаней для вибору такого шляху, який мінімізує відстань $s - A(s) - A(d) - d$. Зазначимо, що отриманий результат є некоректним, якщо найкоротший шлях не містить вершину з T . Отже, фільтр локальності спочатку визначає чи може запит бути локальним (не містить вершини з T) . Якщо це так, запускається альтернативний алгоритм пошуку найкоротшого шляху для обчислення правильної відстані. На Рис. 5 зображена схема TNR запиту. Червоні і сині крапки — вузли доступу вершин s і d. Стрілки вказують на відповідні рядки (стовпці) таблиці відстаней. Виділені записи таблиці відповідають вузлам доступу, які мінімізують відстань $s - d$. Для кращої ефективності зазвичай використовують кілька рівнів транзитних вузлів і вузлів доступу. Для ефективності алгоритму критичним є вибір множини транзитних вузлів. Природньо в якості транзитних вузлів обирати вершинні сепаратори і граничні вершини сепараторів-дуг.

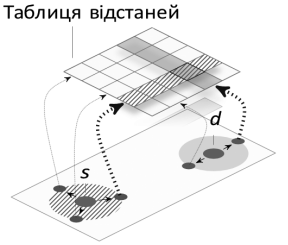


Рис 5. TNR запит

Первинна обробка алгоритму TRANSIT використовує (невеликий) граф зупинок для визначення транзитних вузлів, між якими будується таблиця подорожей з мінімальним часом подорожей. Кожна зупинка p зберігає множину вузлів доступу $A(p)$, визначену на розширеному за часом графі запуском локальних пошуків з кожної події відправлення p до транзитних зупинок. На етапі запиту використовуються вершини доступу зупинок p_s і p_d і таблиця відстаней для вирішення глобальних запитів. Для локальних запитів, виконується запуск алгоритму A*.

1. Висновки

Розглянута залежна від часу задача пошуку найкоротшого шляху, яка використовується, зокрема, для планування подорожі громадським транспортом. Проаналізовано підходи до подання розкладу громадського транспорту у вигляді графа — розширеного за часом моделі графу і залежна від

часу модель. Показані модифікації графу для відображення реалістичних моделей. Досліджені останні підходи розв'язання залежних від часу задач пошуку найкоротших шляхів з врахуванням розкладу.

Література

1. Cooke K. L., Halsey E. The shortest route through a network with time-dependent intermodal transit. — J. Math. Anal. Appl, 1966. — P. 493–498.
2. Bellman R. On a routing problem. — Quarterly of Applied Mathematics, 1958. — P. 87–90.
3. Bellman R. Dynamic Programming — Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1957.
4. Dreyfus S. E. An appraisal of some shortest-path algorithms. — Operations Research, 1969. — P. 395-412.
5. Kaufman D. E., Smith R. L. Fastest paths in time-dependent networks for intelligent vehicle-highway systems application. // J. Intelligent Transportation Systems. — 1993. — №1. — P. 1–11.
6. Pajor T. Algorithm Engineering for Realistic Journey Planning in Transportation Networks [Text] : Dissertation. Doktors der Naturwissenschaften : Tag der m?ndlichen Pr?fung: 15 November 2013 / Thomas Pajor. — 2013. — 266 p.
7. Muller-Hannemann M. Timetable information: Models and algorithms. / Matthias Muller–Hannemann, Frank Schulz, Dorothea Wagner, and Christos Zaroliagis // In Algorithmic Methods for Railway Optimization / Lecture Notes in Computer Science, Springer. — 2007. — V. 4359 — P. 67–90.
8. Hart P. E., Nilsson N., Raphael B. A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths. // IEEE Transactions on Systems Science and Cybernetics. — 1968. — №4. — P. 100–107.
9. Disser Y., Muller–Hannemann M., Schnee M/ Multi-criteria shortest paths in time-dependent train networks. // In Proceedings of the 7th Workshop on Experimental Algorithms (WEA'08) / Lecture Notes in Computer Science, Springer. — 2008. — V. 5038. — P. 347–361.
10. Goldberg A., Harrelson C. Computing the shortest path: A* search meets graph theory. // Technical Report MSR-TR-2004-24, Microsoft Research. — 2004. — 25 p.
11. Delling D., Pajor T., Wagner D. Engineering timeexpanded graphs for faster timetable information. // Robust and Online Large-Scale Optimization / Lecture Notes in Computer Science, Springer. — 2009. — V. 5868 — P. 182–206.
12. Delling D. Time-dependent SHARC-routing. // Algorithmica 60. — 2011. — №1. — P. 60–94.
13. F. Schulz., Wagner D., Weihe K. Dijkstra's algorithm on-line: An empirical case study from public railroad transport. // ACM Journal of Experimental Algorithmics. — 2000. — №5. — P. 1–23.
14. Wagner D., Willhalm T., Zaroliagis C. Geometric containers for efficient shortest-path computation. // ACM Journal of Experimental Algorithmics. — 2005. — №10. — P. 1–30.
15. Hilger M., Kцhler E., Mцhring R. H., Schilling H. Fast point-to-point shortest path computations with arc-flags. // In The Shortest Path Problem: Ninth DIMACS Implementation Challenge. — 2009. — V. 74. — P. 41–72.
16. Delling D. Engineering and augmenting route planning algorithms : Ph.D. thesis, Universitдt Karlsruhe (TH), Fakultдt fur Informatik, 2009. — 2009.

17. Berger A., Delling D., Gebhardt A., Muller–Hannemann M. Accelerating time-dependent multi-criteria timetable information is harder than expected / Annabell Berger // Proceedings of the 9th Workshop on Algorithmic Approaches for Transportation Modeling, Optimization, and Systems (ATMOS'09), OpenAccess Series in Informatics (OASIcs). — 2009.
18. Delling D., Goldberg A. V., Razenshteyn I., Werneck R. F. Graph partitioning with natural cuts. // In 25th International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS'11). — 2011. — P. 1135–1146.
19. Holzer M., Schulz F., Wagner D. Engineering multi-level overlay graphs for shortest-path queries. // Invited for ACM Journal of Experimental Algorithmics. — 2007.
20. F. Schulz. Using multi-level graphs for timetable information in railway systems / Frank Schulz, Dorothea Wagner, and Christos Zaroliagis // Proceedings of the 4th Workshop on Algorithm Engineering and Experiments (ALENEX'02), Lecture Notes in Computer Science, Springer. — 2002. — V. 2409. — P. 43–59.
21. Geisberger R., Sanders P., Schultes D., Vetter Ch. Exact routing in large road networks using contraction hierarchies // Transportation Science. — 2012. — V. 3. — P. 388–404.
22. Schultes D., Sanders P. Dynamic highway-node routing. // In Proceedings of the 6th Workshop on Experimental Algorithms (WEA'07). — 2007. — V. 4525. — P. 66–79.
23. Sanders P., Schultes D. Engineering highway hierarchies. // ACM Journal of Experimental Algorithmics. — 2012. — №17. — P. 1–40.
24. Bast H., Carlsson E., Eigenwillig A., Geisberger R., Harrelson Ch., Raychev V., Viger F. Fast routing in very large public transportation networks using transfer patterns. // In Proceedings of the 18th Annual European Symposium on Algorithms (ESA'10) / Lecture Notes in Computer Science, Springer. — 2010. — V. 6346. — P. 290–301.
25. Google Transit System [Electronic resource] // Google. — Mode of access: http://maps.google.com/landing/transit/index.html .
26. Antsfeld L., Walsh T. Finding multi-criteria optimal paths in multi-modal public transportation networks using the transit algorithm. // In Proceedings of the 19th ITS World Congress, 2012.
27. Sanders P., Schultes D. Robust, almost constant time shortest-path queries in road networks. // In The Shortest Path Problem: Ninth DIMACS Implementation Challenge. — 2009. — V. 74 of DIMACS Book. — P. 193–218.

Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова Національної академії наук України, Проспект Академіка Глушкова, 40, Київ, 03680, Україна.

Надійшла 01.09.2014

УДК 517.9

ДОСЛІДЖЕННЯ ЗАДАЧІ МАКСИМІЗАЦІЇ ДОХОДУ НА ОСНОВІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ РОСТУ КУЛЬТУРИ МІКРООРГАНІЗМІВ

І. П. Сіренко, Л. І. Потапенко, М. В. Пасічна, Н. І. Ляшко

Резюме. В роботі проводиться аналітичне дослідження задачі максимізації доходу на множині розв'язків системи звичайних диференційних рівнянь моделі Херберта, яка описує ріст популяції клітин мікроорганізмів в періодичній глибинній культурі.

Вступ

В роботі [1] наводиться модель Херберта, яка описує ріст популяції клітин мікроорганізмів в періодичній глибинній культурі. Модель подається такою системою рівнянь

$$\frac{dX}{dt} = X\left(\frac{\mu_m S}{K_S + S} - a\right), \tag{1}$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{cXS\mu_m}{K_S + S}, \tag{2}$$

$$X(0) = X_0, \quad S(0) = S_0, \tag{3}$$

де X — концентрація біомаси, S — концентрація субстрату, X_0 — початкова концентрація біомаси, S_0 — початкова концентрація субстрату, μ_m — максимальна питома швидкість синтезу біомаси, K_S — константа насичення швидкості синтезу, a — питома швидкість підтримання життєдіяльності, яка в рамках моделі вважається постійною, c — постійна, що характеризує ефективність перетворення субстрату в біомасу.

Для аналітичного дослідження моделі (1)–(3), за [2] перейдемо до безрозмірних змінних $x = cX/K_S$, $y = S/K_S$, $\tau = \mu_m t$, $\alpha = a/\mu_m$, причому $0 < \alpha < 1$.

Тоді система (1)–(3) набуде вигляду

$$\frac{dx}{d\tau} = x\left(\frac{y}{1+y} - \alpha\right), \tag{4}$$

$$\frac{dy}{d\tau} = -\frac{xy}{1+y}, \tag{5}$$

$$x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0. \tag{6}$$

1. Постановка задачі максимізації доходу на основі досліджуваної моделі

Для розробки конкретних біотехнологічних режимів через економічні обмеження виникає необхідність оптимізувати їх в деякому сенсі. Одним з важливих економічних показників є чистий дохід, що є сумою всіх грошових надходжень від реалізації продукції зі знаком плюс і видатків зі знаком мінус. Таким чином для вирощування біомаси мікроорганізмів в глибинній періодичній культурі функція чистого доходу буде мати вигляд

$$F(X,S,X_0,S_0,t-t_0) = \\ = -A_1X_0V - A_2S_0V + A_3XV + A_4SV - A_5(t-t_0) - A_6, \quad (7)$$

де V — об'єм ферментатора, A_1 — вартість одиниці посівної біомаси, A_2 — вартість одиниці субстрату, A_3 — вартість одиниці вирощеної біомаси (в загальному випадку $A_1 \neq A_3$), A_4 — вартість одиниці залишкового субстрату (в загальному випадку $A_2 \neq A_4$), A_5 — вартість одиниці часу роботи ферментатора, A_6 — одноразові витрати на кожну ферментацію. Перший, другий, п'ятий та шостий доданки описують витрати виробництва, а третій та четвертий — доходи виробництва.

В періодичній культурі об'єм культури не змінюється тому можна можна розглядати чистий дохід на одиницю об'єму ферментатора

$$\tilde{F}(X,S,X_0,S_0,t-t_0) = \frac{F(X,S,X_0,S_0,t-t_0)}{V} = \\ = -A_1X_0 - A_2S_0 + A_3X + A_4S - A_5\frac{(t-t_0)}{V} - A_6\frac{1}{V}. \quad (8)$$

Для зручності аналітичного дослідження перейдемо до безрозрозмірних змінних. Тоді (8) набуде вигляду

$$F(X,S,X_0,S_0,t-t_0) = f(x,y,x_0,y_0,\theta) = \\ = -a_1x_0 - a_2y_0 + a_3x + a_4y - a_5\theta - a_6, \quad (9)$$

де $a_1 = A_1K_S/c$, $a_2 = A_2K_S$, $a_3 = A_3K_S/c$, $a_4 = A_4K_S$, $a_5 = A_5/(\mu_m V)$, $a_6 = A_6/V$, $\theta = \tau - \tau_0$.

Таким чином, задача максимізації чистого доходу при вирощуванні біомаси в періодичній глибинній культурі зводиться до такою задачі нелінійної оптимізації

$$max f(z) \quad (10)$$

при $x > 0,\ y > 0,\ x_0 > 0,\ y_0 > 0,\ \tau > 0$ та умовах, що є розв'язком системи (4)–(6) [1].

$$g_1(z) \equiv x - x_0 + (1-\alpha)(y-y_0) - \alpha\ln(y/y_0) = 0, \quad (11)$$

$$g_2(z) \equiv -\tau + \int_{y_0}^{y} \frac{(1+u)du}{u[(1-\alpha)(u-y_0) - \alpha\ln(u/y_0) - x_0]}, \quad (12)$$

де $z = (x, y, x_0, y_0, \theta)$.

2. Дослідження задачі максимізації доходу

Для аналізу задачі (10)–(12) використаємо функцію Лагранжа

$$L(z,\lambda) = f(z) - \lambda_1 g_1(z) - \lambda_2 g_2(z),$$

де $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)$, λ_1, λ_2 — множники Лагранжа, $g_1(z)$ та $g_2(z)$ задаються залежностями (11), (12).

Якщо в точці $z^* = (x^*, y^*, x_0^*, y_0^*, \theta^*)$ досягається максимум функції $f(z)$ при умовах (11) і (12), то існує хоча б одна ненульова система множників Лагранжа $\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*)$ така, що точка (z^*, λ^*) є точкою стаціонарності функції Лагранжа $L(z,\lambda)$ за змінними $x, y, x_0, y_0, \theta, \lambda_1, \lambda_2$, які розглядаються як незалежні змінні. Необхідні умови стаціанарності функції Лагранжа зводяться до такою системи з 7 рівнянь

$$\frac{\partial L}{\partial x_0} \equiv -a_1 + \lambda_1 - \lambda_2 h(x_0, y_0, y) = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial y_0} \equiv -a_2 - \lambda_1(\alpha - 1 + \frac{\alpha}{y_0}) + \lambda_2(h(x_0, y_0, y)(\alpha - 1 + \frac{\alpha}{y_0}) - \frac{1+y_0}{x_0 y_0}) = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} \equiv a_3 - \lambda_1 = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial y} \equiv a_4 - \lambda_1(\alpha - 1 + \frac{\alpha}{y}) - \lambda_2 \frac{1+y}{y((1-\alpha)(y-y_0) - \alpha \ln \frac{y}{y_0} - x_0)} = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} \equiv -a_5 + \lambda_2 = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} \equiv -g_1(z) = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} \equiv -g_2(z) = 0,$$

де

$$h(x_0, y_0, y) = \int_{y_0}^{y} \frac{(1+u)du}{u(x_0 + (\alpha-1)(u-y_0) + \alpha \ln \frac{u}{y_0})^2}.$$

Легко бачити, що ця система еквівалентна такій

$$a_1 - a_3 + a_5 h(x_0, y_0, y) = 0, \tag{13}$$

$$a_2 + a_1(\alpha - 1 + \frac{\alpha}{y_0}) + a_5 \frac{1+y_0}{x_0 y_0} = 0, \tag{14}$$

$$a_4 + a_3(\alpha - 1 + \frac{\alpha}{y}) + a_5 \frac{1+y}{xy} = 0, \tag{15}$$

$$x - x_0 - (\alpha - 1)(y - y_0) - \alpha \ln \frac{y}{y_0} = 0, \tag{16}$$

$$\theta = -\int_{y_0}^{y} \frac{(1+u)du}{u(x_0 + (\alpha-1)(u-y_0) + \alpha \ln \frac{u}{y_0})}, \tag{17}$$

$$\lambda_1 = a_3, \quad \lambda_2 = a_5.$$

Для будь-якого розв'язку системи рівнянь (13)–(17) вектори $\operatorname{grad} g_1$ та $\operatorname{grad} g_2$ є лінійно незалежними, а

$$\operatorname{grad} f = \operatorname{grad} g_1 + \operatorname{grad} g_2,$$

тому для розв'язку $z^* = (x^*, y^*, x_0^*, y_0^*, \theta^*)$ задачі (10)–(12) існує єдина ненульова система множників Лагранжа $\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*)$ така, що точка (z^*, λ^*) є стаціонарною точкою функції Лагранжа $L(z, \lambda)$.

Отже, справджується така теорема

Теорема 1. *Нехай z^* розв'язок задачі (10)–(12). Тоді справджуються такі твердження:*

1. *z^* є розв'язком системи рівнянь (13)–(17);*
2. *$a_3 < a_1$, $(1-\alpha)a_1 > a_2$, $(1-\alpha)a_3 > a_4$;*
3. *$x_0^* > a_5/((1-\alpha)a_1 - a_2)$, $y_0^* > a_1\alpha/[(1-\alpha)a_1 - a_2]$*
4. *$x^* > a_5/((1-\alpha)a_3 - a_4)$, $y^* > a_1\alpha/[(1-\alpha)a_3 - a_4]$*

Пункт 1 є наслідком метода множників Лагранжа.

Очевидно що рівняння (13)–(16) складають систему для знаходження невідомих x_0, y_0, x, y. Зокрема рівняння (14)–(15) дають необхідні співвідношення x_0 та y_0, а також між x та y відповідно для оптимального розв'язку:

$$x_0 = -\frac{a_5(1+y_0)}{(a_2 + a_1\alpha - a_1)y_0 + a_1\alpha}, \tag{18}$$

$$x = -\frac{a_5(1+y)}{(a_4 + a_3\alpha - a_3)y + a_3\alpha}. \tag{19}$$

З (18) випливає, що

$$\lim_{y_0 \to \infty} x_0 = \frac{a_5}{(1-\alpha)a_1 - a_2} = x_1.$$

Якщо в (14) y_0 виразити через x_0, то отримаємо

$$y_0 = -\frac{a_5 + a_1\alpha x_0}{x_0(a_2 + a_1\alpha - a_1) + a_5}.$$

Звітси отримуємо

$$\lim_{x_0 \to \infty} y_0 = \frac{a_1\alpha}{(1-\alpha)a_1 - a_2} = y_1.$$

При $(1-\alpha)a_1 > a_2$ та $a_1 > a_2$ легко бачити, що

$$\frac{dx_0}{dy_0} = \frac{a_5(a_2 - a_1)}{[(a_2 + a_1\alpha - a_1)y_0 + a_1\alpha]^2} < 0.$$

Отже, функція $x_0 = x_0(y_0)$, що задається рівнянням (18) монотонно спадає.

Якщо ж $(1-\alpha)a_1 \le a_2$, то

$$x_0 = -\frac{a_5(1-y_0)}{[a_2 - a_1(1-\alpha)]y_0 + a_1\alpha} < 0$$

при будь-якому y_0, що суперечить фізичному сенсу x_0. Отже, при $(1-\alpha)a_1 \le a_2$ функція Лагранжа не має стаціонарних точок з умовою $x_0 > 0$, $y_0 > 0$. Це означає, що задача знаходження максимума функції $f(z)$ при умовах (11), (12) не має розв'язку.

Аналогічно попередньому з (19) маємо:

1. $x_2 = \lim_{y\to\infty} x = \dfrac{a_5}{(1-\alpha)a_3 - a_4}$, $y_2 = \lim_{x\to\infty} y = \dfrac{a_3\alpha}{(1-\alpha)a_3 - a_4}$;
2. При $(1-\alpha)a_3 > a_4$ функція $x = x(y)$, що задається рівністю (19), монотонно спадає (крива 2 на рис. 1), $x_2 > 0$, $y_2 > y^0$;
3. Якщо $(1-\alpha)a_3 \le a_4$ то $x < 0$ при будь-якому y, тобто задача знаходження максимума функції $f(z)$ при умовах (11), (12) не має розв'язку.

Легко бачити, що $h \le 0$ через те, що $y \le y_0$. Тоді з (13) витікає, що $a_3 \le a_1$, причому $a_3 = a_1$ при $h = 0$, тобто $y = y_0$, $x = x_0$, $\tau = 0$. При $a_3 > a_1$ задача знаходження максимума функції $f(z)$ при умовах (11), (12) не має розв'язку через те, що не виконується необхідна умова (13).

Таким чином, Теорема 1 дає деякі необхідні умови існування розв'язку задачі (10)–(12), однак нічого не не каже про знечення функціонала чистого доходу $f(z)$. Хоча дана задача має сенс і при значеннях $f(z) \le 0$ (у цьому випадку мова йтиме про мінімізацію збитків), проте більший інтерес являє пошук умов, при яких $f(z) > 0$. Відповідь на це запитання дає

Теорема 2. *Функціонал чистого доходу $f(z)$ може набувати додатніх значень (при умові, що існують інтервали часу, на яких значення $f(z)$ зростає), тільки у двох випадках:*

1. *якщо $(1-\alpha)a_3 > a_4$ та $a_3 > a_1$;*
2. *якщо $(1-\alpha)a_3 > a_4$, $a_3 \le a_1$, $a_2 < (1-\alpha)a_3$, $a_2 < (1-\alpha)a_1$.*

Вище було показано, що при $(1-\alpha)a_3 \le a_4$ чистий дохід зменшується з плином часу. Отже необхідною умовою зростання чистого доходу є умова $(1-\alpha)a_3 > a_4$.

Підставивши x з (11) у вираз для $f(z)$ отримаємо

$$f(z) = (a_3 - a_1)x_0 - y_0[a_2 - a_3(1-\alpha)] - y[a_3(1-\alpha) - a_4] + a_3\alpha \ln\frac{y}{y_0} - a_5\tau - a_6.$$

Якщо $a_3 > a_1$, то з ростом x_0 член $(a_3 - a_1)x_0$ можна зробити як завгодно великим (тут ми не враховуємо чисто фізіологічні обмеження на x_0) При цьому доданки у виразі для $f(z)$ (крім $a_5\tau$) не змінюються, а τ зменшується тому, що в (12) знаменник підінтегрального виразу збільшується. Отже при достатньо великих x_0 можливо $f(z) > 0$.

Нехай $a_3 \le a_1$. Якщо $a_2 \ge (1-\alpha)a_3$ то $f(z) < 0$ для будь-якого z, тому що меншими нуля будуть і всі доданки у виразі для $f(z)$. Якщо ж $a_2 < (1-\alpha)a_3$ то з представлення $f(z)$ у вигляді

$$f(z) = (a_3 - a_1)x_0 + y_0[a_1(1-\alpha) - a_2] + y_0(1-\alpha)(a_3 - a_1) - \\ - y[a_3(1-\alpha) - a_4] + a_3\alpha \ln\frac{y}{y_0} - a_5\tau - a_6$$

витікає, що при $a_2 \ge (1-\alpha)a_3$ значення $f(z) < 0$ для будь-якого z, а при $a_2 < (1-\alpha)a_3$ можуть існувати такі значення z, при яких $f(z) > 0$.

Висновки

Якщо перейти до вихідних змінних то можна зробити такі висновки (відмітимо, що всі умови залежать не тільки від вихідних вартостей A_i, $i = \overline{1,6}$, але і від фізіологічних парметрів конкретної культури мікроорганізмів (μ_m, K_S, c, a):

1. Задача максимізації чистого доходу при вирощуванні біомаси в гомогенній періодичній культурі має розв'язок, якщо $A_3 < A_4$, $(1 - a/\mu_m)A_1c > A_2, (1 - a/\mu_m)A_3c > A_4$;
2. Оптимальні початкові значення концентрації біомаси X_0^* та концентрації субстрату S_0^* повинні задовольняти співвідношення
$$X_0 = -\frac{A_5(K_S + S_0)}{V\left\{\left[\frac{A_2\mu_m}{c} + A_1(\mu_m - a)\right]S_0 + A_1aK_S\right\}}, \tag{20}$$
звідси випливає, що необхідно виконання умов
$$X_0^* > X_1 = \frac{A_5}{V\left[A_1(\mu_m - a) - \frac{A_2\mu_m}{c}\right]},$$
$$S_0^* > S_1 = \frac{aA_1K_S}{\left[A_1(\mu_m - a) - \frac{A_2\mu_m}{c}\right]}.$$
В іншому випадку процес буде не оптимальним.
3. Оптимальні кінцеві значення концентрації біомаси X^* та концентрації субстрату S^* повинні задовольняти співвідношення
$$X = -\frac{A_5(K_S + S)}{V\left\{\left[\frac{A_4\mu_m}{c} + A_3(a - \mu_m)\right]S + A_3aK_S\right\}}, \tag{21}$$
в іншому випадку процес буде не оптимальним.
4. Якщо $(1 - a/\mu_m)A_3c \le A_4$, то процес економічно збитковий.
5. Вирощування глибинної періодичної культури може приносити чистий дохід у двох випадках:
   (a) коли $(1 - a/\mu_m)A_3 > A_4$ та $A_3 \ge A_1$ (ця умова збігається з умовою висновку 5 і тому, відповідно, необхідно враховувати чисто фізіологічні обмеження на X_0);
   (b) коли до умов існування розв'язку задачі максимізації чистого доходу додається умова $A_3c(1 - a/\mu_m) \ge A_2$.
   Відмітимо, що ці умови необхідні, але не достатні для отримання чистого доходу.

Література

1. Сіренко І. П. Дослідження математичної моделі росту культури мікроорганізмів. I. Основні властивості моделі // Журн. обчисл. та приклад. матем. — 2011, №1(104). — С. 121–126.
2. Романовский Ю. Я., Степанова Н. В., Чернавский Д. С. Математическая биофизика. — М.: Наука, 1984. — 304 с.

Факультет кібернетики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна.
Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, пр. Академіка Глушкова, 40, Київ, 03680 МСП, Україна.

Надійшла 05.09.2014

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, №1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.9

ДЕЦЕНТРАЛІЗОВАНИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОНОТОННИХ ВАРІАЦІЙНИХ НЕРІВНОСТЕЙ

О. А. Харченко, В. І. Царук, Л. М. Чабак

Резюме. В роботі розглядаються варіаційні нерівності з монотонними операторами, що діють у гільбертовому просторі. Вважається, що оператор нерівності є сумою монотонних операторів, а допустима множина є перетином опуклих замкнених множин. Для розв'язання нерівностей запропоновано децентралізований ітераційний алгоритм з довільним зв'язним графом зв'язків між агентами-користувачами. Доведено теорему про слабку збіжність алгоритму.

Ключові слова: Варіаційна нерівність, монотонний оператор, декомпозиція, децентралізація, алгоритм, збіжність.

1. Вступ

Велика кількість актуальних проблем, таких як мережеві задачі розподілення ресурсів, розподіл потоків, тощо можуть бути сформульовані у вигляді задач на розв'зання варіаційних нерівностей [1]–[4]. Побудова та дослідження методів розв'язання варіаційних нерівностей є цікавим та багатим на результати напрямом прикладного нелінійного аналізу [3, 5]–[16].

З розвитком комп'ютерної техніки і появою багатоядерних процесорів для персональних комп'ютерів все більшої актуальності набувають алгоритми декомпозиції [17]–[21], зокрема, ті, що спираються на паралельну організацію обчислень [4, 22]–[26]. Вони дозволяють розбити велику задачу на дрібніші підзадачі, які обчислюються простіше і можуть обчислюватись одночасно. За рахунок цього загальна складність алгоритму зростає, але час виконання зменшується. З розвитком комп'ютерних мереж загалом та, перш за все, мережі Internet особливе місце в паралельних обчисленнях посіли розподілені обчислення: розподіл задачі не на окремі процесори одного комп'ютера, а на різні комп'ютери мережі. Важливу роль в них відіграють GRID-системи — мережі комп'ютерів, що надають свої ресурси для виконання обчислювальних задач через єдиний інтерфейс, відкриті або закриті для вільного доступу.

В даній роботі розглядаються варіаційні нерівності з монотонними операторами, що діють у гільбертовому просторі. Вважається, що оператор нерівності є сумою монотонних операторів, а допустима множина є перетином опуклих замкнених множин. Для розв'язання таких нерівностей

запропоновано децентралізований ітераційний алгоритм, подібний до розглянутого в роботі [4]. Суттєвою вімінністю від [4] є те, що в ми будуємо алгоритм на мережі з довільним зв'язним графом зв'язків між агентами-користувачами. В [4] розглядався повний граф.

Основний результат даної роботи — теорема про слабку збіжність запропонованого децентралізованого алгоритму.

2. Постановка задачі

Нехай H — дійсний гільбертовий простір. Розглянемо мережу з множиною користувачів $I = \{1, .., K\}$. Кожному з користувачів мережі відповідає оператор $A^{(i)} : H \to H$, $i \in I$ та деяка множина $C^{(i)} \subseteq H$, $i \in I$. Ці дані є прихованою інформацією користувачів і не можуть бути отримані іншими користувачами мережі. Нехай $A^{(i)}, C^{(i)}, i \in I$ задовільняють такі умови.

Умова 1.

1. *Кожен оператор $A^{(i)}$, $i \in I$ — строго монотонний і хемінеперервний.*
2. *Кожна множина $C^{(i)}$, $i \in I$ — непорожня, обмежена, замкнена та опукла підмножина H.*
3. *Множина $C = \bigcap_{i \in I} C^{(i)}$ непорожня.*

Кожен користувач взаємодіє з сусідніми користувачами відповідно до неорієнтованого зв'язного графу Г. Позначимо $I^{(i)} \subseteq I$ множину суміжних вершин з вершиною i.

Розглянемо таку задачу.

Задача 1. *Знайти*

$$x^* \in VI\left(C, \sum_{i \in I} A^{(i)}\right) = \left\{x^* \in C : \left\langle y - x^*, \sum_{i \in I} A^{(i)}(x^*) \right\rangle \geq 0 \ \forall \ y \in C\right\}.$$

Припустимо, що $VI\left(C, \sum_{i \in I} A^{(i)}\right) \neq \emptyset$.

Зауважимо, що умова 1.1 гарантує, що оператор $A = \sum_{i \in I} A^{(i)}$ — строго монотонний і хемінеперервний. З умов 1.2 і 1.3 випливає, що допустима множина $C = \bigcap_{i \in I} C^{(i)}$ — непорожня, замкнена, опукла і обмежена. Отже, задача 1 має єдиний розв'язок.

3. Децентралізований проксимальний алгоритм

Опишемо децентралізований проксимальний алгоритм розв'язання задачі 1.

На початку кожен користувач отримує точку початкового наближення $\bar{x}_0^{(i)}$ та послідовність розмірів кроку $(\alpha_n) \subset [0, 1]$, $\alpha_n \in [0, 1]$. Послідовність (α_n) задовільняє таку умову.

Умова 2.

1. $\alpha_{n+1} \leq \alpha_n$ *для всіх* $n \in \mathbb{N}$,
2. $\lim_{n \to \infty} \alpha_n = 0$,

3. $\sum_{n\to\infty}\alpha_n = +\infty$.

Прикладом такої послідовності є послідовність $\alpha_n = \frac{1}{n}$.

Також користувачі отримують матрицю усереднень $S = \{s_{ij}\}_{i\in I}$, що має наступні властивості.

Умова 3.

1. $S^T = S$;
2. $\sum_{i=1}^{K} s_{ij} = 1$;
3. $s_{ij} > 0$, *якщо* i*-й та* j*-й користувачі взаємодіють між собою,* $s_{ij} = 0$ *в іншому випадку.*

Зауваження 1. Таку матрицю можна отримати наступним чином:

$s_{ij} = 1/K$, якщо i-й та j-й користувачі з'єднані між собою та $i \neq j$.
$s_{ij} = 0$, якщо i-й та j-й користувачі не з'єднані між собою.
$s_{ii} = 1 - \sum_{j\neq i} s_{ij}$.

Тепер ми можемо сформулювати алгоритм розв'язку задачі 1.

Алгоритм 1.

1. Покладемо $n := 0$;
2. Кожен користувач у відповідності з отриманим $\bar{x}_n^{(i)}$ обчислює точку
$$x_{n+1}^{(i)} = P_{C^{(i)}}\left(\bar{x}_n^{(i)} - \alpha_{n+1}A^{(i)}\left(x_{n+1}^{(i)}\right)\right), i \in I. \tag{1}$$
Ця точка передається всім сусіднім користувачам відповідно до графу Г.
3. Користувачі обчислюють
$$\bar{x}_{n+1}^{(i)} = \sum_{j\in I^{(i)}} s_{ij}x_{n+1}^{(j)}, \tag{2}$$
а також наступні середні значення:
$$z_{n+1}^{(i)} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_k}\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_k x_k^{(i)}. \tag{3}$$
Кладемо $n = n + 1$ і переходимо на крок 2.

Зауваження 2. Рівняння з (1) має єдиний розв'язок $x_{n+1}^{(i)}$.

Зауваження 3. У випадку, якщо оператор $A^{(i)}$ є похідною по Гато опуклого функціоналу $f_i(x)$, (1) набуває вигляду:
$$x_{n+1}^{(i)} = \mathrm{prox}_{\alpha_n f_i}(\bar{x}_n^{(i)}) = \mathrm{argmin}_{x\in C^{(i)}}\left\{\frac{1}{2}\left\|x - \bar{x}_n^{(i)}\right\| + \alpha_n f_i(x)\right\}.$$

Оскільки для довільного $j \notin I^{(i)}$ $s_{ij} = 0$, то
$$\sum_{j\in I^{(i)}} s_{ij}x_{n+1}^{(j)} = \sum_{j\in I} s_{ij}x_{n+1}^{(j)}.$$

Основним результатом даної роботи є

Теорема 1. *Згенеровані алгоритмом 1 послідовності* $(z_{n+1}^{(i)})$ *слабко збігаються до єдиного розв'язку задачі при довільному* $i \in I$.

Наступний пункт присвячено доведенню теореми 1.

4. Доведення збіжності алгоритму

Має місце

Лема 1. *Нехай* $\left(z_{n+1}^{(i)}\right)$, $\left(x_n^{(i)}\right)$, $\left(\bar{x}_n^{(i)}\right)$, $i \in I$ — *послідовності, згенеровані алгоритмом 1. Тоді:*

1) $\left(z_{n+1}^{(i)}\right)$, $\left(x_n^{(i)}\right)$, $\left(\bar{x}_n^{(i)}\right)$, $i \in I$ — *обмежені;*
2) *для будь-яких* $n \in \mathbb{N}$ *і* $y \in C$

$$-\frac{\sum_{i\in I}\|\bar{x}_0^{(i)}-y\|^2}{\sum_{k=0}^{n}\alpha_{k+1}} \le 2\sum_{i\in I}\left\langle y - z_{n+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\right\rangle - \\ -\sum_{i\in I}\frac{\sum_{k=0}^{n}\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2}{\sum_{k=0}^{n}\alpha_{k+1}}; \quad (4)$$

3) *існує* $M \in \mathbb{R}$ *таке, що для довільного* $i \in I$ *та довільного* $n \in \mathbb{N}$ *виконується оцінка*

$$\sum_{k=0}^{n}\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2 \le M\sum_{k=0}^{n}\alpha_{k+1}.$$

Доведення. Пункт 1) випливає з обмеженості та опуклості множин $C^{(i)}$.

Доведемо 2). Зафіксуємо $i \in I$. Для довільного $k \in \mathbb{N}$

$$\|x_{k+1}^{(i)}-y\|^2 = \|P_{C^{(i)}}\left(\bar{x}_k^{(i)}-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\right)-P_{C^{(i)}}(y)\|^2 \le \\ \le \left\langle \bar{x}_k^{(i)}-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})-y, x_{k+1}^{(i)}-y\right\rangle = \\ = \frac{1}{2}\Big(\|\bar{x}_k^{(i)}-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})-y\|^2+\|x_{k+1}^{(i)}-y\|^2- \\ -\|(\bar{x}_k^{(i)}-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})-y)-(x_{k+1}^{(i)}-y)\|^2\Big),$$

звідси:

$$\|x_{k+1}^{(i)}-y\|^2 \le \|(\bar{x}_k^{(i)}-y)-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\|^2-\|(\bar{x}_k^{(i)}-x_{k+1}^{(i)})-\alpha_{k+1}A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\|^2 = \\ = \|\bar{x}_k^{(i)}-y\|^2-2\alpha_{k+1}\langle\bar{x}_k^{(i)}-y, A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\rangle- \\ -\|\bar{x}_k^{(i)}-x_{k+1}^{(i)}\|^2-2\alpha_{k+1}\langle x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}, A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\rangle = \\ = \|\bar{x}_k^{(i)}-y\|^2+2\alpha_{k+1}\langle y-x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\rangle-\|\bar{x}_k^{(i)}-x_{k+1}^{(i)}\|^2.$$

З монотонності оператора $A^{(i)}$ випливає, що $\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle \ge \langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(x_{k+1}^{(i)})\rangle$. Отже, отримаємо:

$$\|x_{k+1}^{(i)}-y\|^2 \le \|\bar{x}_k^{(i)}-y\|^2+2\alpha_{k+1}\langle y-x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle-\|\bar{x}_k^{(i)}-x_{k+1}^{(i)}\|^2.$$

Зафіксуємо $j \in I$. Домножимо отриману нерівність на s_{ij} та просумуємо по i:

$$\sum_{i\in I} s_{ij}\|x_{k+1}^{(i)} - y\|^2 \leq$$
$$\leq \sum_{i\in I} s_{ij}\left(\|\bar{x}_k^{(i)} - y\|^2 + 2\alpha_{k+1}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2\right).$$

З іншого боку маємо

$$\|\bar{x}_{k+1}^{(j)} - y\|^2 = \|\sum_{i\in I} s_{ij}x_{k+1}^{(i)} - y\|^2 \leq \sum_{i\in I} s_{ij}\|x_{k+1}^{(i)} - y\|^2$$

і

$$\|\bar{x}_{k+1}^{(j)} - y\|^2 \leq \sum_{i\in I} s_{ij}\left(\|\bar{x}_k^{(i)} - y\|^2 + 2\alpha_{k+1}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2\right).$$

Просумуємо отримане по $j \in I$

$$\sum_{j\in I} \|\bar{x}_{k+1}^{(j)} - y\|^2 \leq$$
$$\leq \sum_{i\in I} s_{ij}\left(\|\bar{x}_k^{(i)} - y\|^2 + 2\alpha_{k+1}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2\right) =$$
$$= \sum_{i\in I}\left(\|\bar{x}_k^{(i)} - y\|^2 + 2\alpha_{k+1}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2\right)\sum_{j\in I} s_{ij}.$$

Оскільки матриця S симетрична, а сума всіх її рядків дорівнює 1, то $\sum_{j\in I_i} s_{ij} = \sum_{j\in I} s_{ji} = 1$. Отже, отримаємо:

$$\sum_{i\in I} \|\bar{x}_{k+1}^{(i)} - y\|^2 \leq \sum_{i\in I} \|\bar{x}_k^{(i)} - y\|^2 +$$
$$+ 2\alpha_{k+1}\sum_{i\in I}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \sum_{i\in I} \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2.$$

Просумуємо отриману нерівність по k від 0 до m.

$$\sum_{i\in I} \|\bar{x}_{m+1}^{(i)} - y\|^2 \leq \sum_{i\in I} \|\bar{x}_0^{(i)} - y\|^2 +$$
$$+ 2\sum_{k=0}^{m}\alpha_{k+1}\sum_{i\in I}\langle y - x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\rangle - \sum_{k=0}^{m}\sum_{i\in I} \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2.$$

Отже, для довільного $y \in C$

$$-\sum_{i\in I} \|\bar{x}_0^{(i)} - y\|^2 \leq$$
$$\leq 2\sum_{i\in I}\left\langle \sum_{k=0}^{m}\alpha_{k+1}y - \sum_{k=0}^{m}\alpha_{k+1}x_{k+1}^{(i)}, A^{(i)}(y)\right\rangle - \sum_{k=0}^{m}\sum_{i\in I} \|\bar{x}_k^{(i)} - x_{k+1}^{(i)}\|^2,$$

і

$$-\frac{\sum_{i\in I}\|\bar{x}_0^{(i)}-y\|^2}{\sum_{k=0}^m\alpha_{k+1}}\le 2\sum_{i\in I}\left\langle y-z_{m+1}^{(i)},A^{(i)}(y)\right\rangle-\sum_{i\in I}\frac{\sum_{k=0}^m\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2}{\sum_{k=0}^m\alpha_{k+1}},$$

що і треба було довести.

Перейдемо до доведення 3). З обмеженості $\left(z_{n+1}^{(i)}\right)$, а також розбіжності ряду $\sum_{n\to\infty}\alpha_n$, отримаємо обмеженість $\sum_{k=0}^m\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2$. Звідси, для будь-якого $i\in I$ існує $M\in\mathbb{R}$: $\sum_{k=0}^n\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2\le M\sum_{k=0}^n\alpha_{k+1}$. Зі скінченності множини I випливає існування спільного для всіх $M\in\mathbb{R}$. □

Лема 2. *Послідовність* $\left(\frac{\sum_{k=0}^m\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2}{\sum_{k=0}^m\alpha_{k+1}}\right)$ *— обмежена для довільних* i, $j\in I$.

Доведення. Розглянемо доданок $\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|$:

$$\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2\le\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(i)}\|^2+\|\bar{x}_k^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2.$$

Оскільки обмеженість відповідної суми для $i=j$ випливає з пункту 3) попередньої леми, то достатньо довести наступне:

$$\sum_{k=0}^m\|\bar{x}_k^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2\le\bar{M}\sum_{k=0}^n\alpha_{k+1}\tag{5}$$

для довільних i, $j\in I$ та деякого $\bar{M}\in\mathbb{R}$.

Розпишемо один з доданків цієї суми:

$$\|\bar{x}_k^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2=\left\|\sum_{l\in I}s_{li}x_k^{(l)}-\sum_{p\in I}s_{pj}x_k^{(p)}\right\|^2.$$

Зведемо доданки за наступним алгоритмом:

Алгоритм 2.

1. Для всіх $l\in I$, якщо $s_{li}>0$ і $s_{pj}>0$, то зведемо їх. Отримаємо набори $\hat{s}_{li},\hat{s}_{pj}$. При цьому $\sum_{l\in I}\hat{s}_{li}=\sum_{p\in I}\hat{s}_{pj}$, оскільки $\sum_{l\in I}s_{li}=\sum_{p\in I}s_{pj}$.
2. З $\hat{s}_{li}$ виділимо найбільший елмент $\overline{s}_{li}$, з $\hat{s}_{pj}$ — найменший ненульовий $\underline{s}_{pj}$. Якщо $\underline{s}_{pj}>\overline{s}_{li}$, змінимо знак під нормою і повторимо процедуру.

3. Позначимо $\underline{s}_{pj} = \lambda_1^{(lp)} = \lambda_1^{(lp)}(i,j)$ і винесемо $\lambda_1^{(lp)} x_k^{(l)} - \lambda_1^{(lp)} x_k^{(p)}$ з модуля за нерівністю трикутника, отримавши:

$$\left\| \sum_{l\in I} s_{li} x_k^{(l)} - \sum_{p\in I} s_{pj} x_k^{(p)} \right\|^2 \leq$$

$$\leq \left\| \sum_{l\in I} \dot{s}_{li} x_k^{(l)} - \sum_{p\in I} \dot{s}_{pj} x_k^{(p)} \right\|^2 + \lambda_1^{(lp)} \|x_k^{(l)} - x_k^{(p)}\|^2.$$

Тут $\dot{s}_{lj}$ — залишок набору. Повторимо крок 2, позначивши $\hat{s}_{li} = \dot{s}_{li}$, $\hat{s}_{lj} = \dot{s}_{lj}$.

Застосувавши даний алгоритм отримаємо суму:

$$\left\| \sum_{l\in I} s_{li} x_k^{(l)} - \sum_{l\in I} s_{lj} x_k^{(l)} \right\|^2 = \left\| \sum_{p,q\in I} \lambda_1^{(p,q)} (x_k^{(p)} - x_k^{(q)}) \right\|^2 \leq$$

$$\leq \sum_{p,q\in I} \lambda_1^{(p,q)} \|x_k^{(p)} - x_k^{(q)}\|^2.$$

Тут коефіцієнти $\lambda_1^{(i,j)}$ не залежать від поточного кроку k, а залежать лише від (i,j) та матриці S. Також, $\sum_{p,q\in I} \lambda_1^{(p,q)} \leq 1$, а у випадку, якщо i,j мають спільного сусіда, то $\sum_{p,q\in I} \lambda_1^{(p,q)} < 1$. Розпишемо один з отриманих доданків:

$$\|x_k^{(p)} - x_k^{(q)}\|^2 \leq \|x_k^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2 + \|x_k^{(q)} - \bar{x}_{k-1}^{(q)}\|^2 + \|\bar{x}_{k-1}^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(q)}\|^2.$$

Підставимо отримане в попередню нерівність:

$$\|\bar{x}_k^{(i)} - \bar{x}_k^{(j)}\|^2 \leq \sum_{p,q\in I} \lambda_1^{(p,q)} \|\bar{x}_{k-1}^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(q)}\|^2 + 2 \sum_{p\in I} \bar{\lambda}_1^{(p)} \|x_k^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2,$$

де $2\bar{\lambda}_1^{(p)} = \sum_{q\neq p} \lambda_1^{(p,q)}$, а $\sum_{p\in I} \bar{\lambda}_1^{(p)} \leq 1$.

Розписавши відповідно всі доданки $\|\bar{x}_{k-1}^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(q)}\|$, в підсумку отримаємо:

$$\|\bar{x}_m^{(i)} - \bar{x}_m^{(j)}\|^2 \leq \sum_{k=1}^{m} 2 \sum_{p\in I} \bar{\lambda}_{m-k+1}^{(p)} \|x_k^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2 +$$

$$+ \sum_{p,q\in I} \lambda_m^{(p,q)} \|\bar{x}_0^{(p)} - \bar{x}_0^{(q)}\|^2 = \sum_{k=1}^{m} 2 \sum_{p\in I} \bar{\lambda}_{m-k+1}^{(p)} \|x_k^{(p)} - \bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2 + \lambda_m M_0. \quad (6)$$

Тут $\lambda_m = \sum_{p,q\in I} \lambda_m^{(p,q)} = 2 \sum_{p\in I} \bar{\lambda}_m^{(p)}$, а $M_0 = \sum_{p,q\in I} \|\bar{x}_0^{(p)} - \bar{x}_0^{(q)}\|^2$.

Підставивши доданки в суму, нерівність перетвориться на:

$$\sum_{m=0}^{n}\|\bar{x}_m^{(i)}-\bar{x}_m^{(j)}\|^2\le\sum_{m=0}^{n}\left(\sum_{k=1}^{m}2\sum_{p\in I}\bar{\lambda}_{m-k+1}^{(p)}\|x_k^{(p)}-\bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2+\lambda_m M_0\right)=$$

$$=2\sum_{p\in I}\sum_{m=0}^{n}\bar{\lambda}_m^{(p)}\sum_{k=1}^{m}\|x_k^{(p)}-\bar{x}_{k-1}^{(p)}\|^2+M_0\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\le$$

$$\le 2\sum_{p\in I}\sum_{m=0}^{n}\bar{\lambda}_m^{(p)}M\sum_{k=1}^{m}\alpha_k+M_0\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\le$$

$$\le 2M\sum_{p\in I}\sum_{m=0}^{n}\bar{\lambda}_m^{(p)}\sum_{k=1}^{n}\alpha_k+M_0\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\le 2M\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\sum_{m=0}^{n}\sum_{p\in I}\bar{\lambda}_m^{(p)}+M_0\sum_{m=0}^{n}\lambda_m.$$

Оскільки $\lambda_m=\sum_{p,q\in I}\lambda_m^{(p,q)}=2\sum_{p\in I}\bar{\lambda}_m^{(p)}$, отримаємо

$$\sum_{m=0}^{n}\|\bar{x}_m^{(i)}-\bar{x}_m^{(j)}\|^2\le$$

$$\le\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\left(2M\sum_{k=1}^{n}\alpha_k+M_0\right)\le M'\left(\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\right)\left(\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\right).\quad(7)$$

Доведемо тепер збіжність ряду $\sum_{m=0}^{n}\lambda_m$. Оцінимо знизу найменший коефіцієнт при модулях в отриманій сумі. Введемо число

$$\lambda=\min_{i,j,p,q\in I}\{a=\lambda_1^{(p,q)}(i,j):a>0\}.$$

Очевидно, що довільний ненульовий коефіцієнт $\lambda_1^{(p,q)}\ge\lambda, p,q\in I$, а, відповідно, $\lambda_m^{(p,q)}\ge\lambda^m$.

Позначимо діаметр графа Γ як D_Γ. Розглянемо найкоротший маршрут між i-м та j-м користувачами. Нехай довжина цього маршруту $d\le D_\Gamma$. Розглянемо (6), розписавши його до кроку $m=k-d+1$:

$$\sum_{p,q\in I}\lambda_{d-1}^{(p,q)}\|\bar{x}_{k-d+1}^{(p)}-\bar{x}_{k-d+1}^{(q)}\|^2.$$

Тут $\sum_{p,q\in I}\lambda_{d-1}^{(p,q)}\le 1$. Оскільки це передостанній крок маршруту, то для $p=i,j$ існують такі $q=q^*$, що i-й або j-й користувач суміжні з q^*. Розглянемо один з цих доданків:

$$\lambda_{d-1}^{(i,q^*)}\|\bar{x}_{k-d+1}^{(i)}-\bar{x}_{k-d+1}^{(q^*)}\|^2=\lambda_{d-1}^{(i,q^*)}\left\|\sum_{p\in I}\left(s_{pi}x_{k-d+1}^{(p)}-s_{pq^*}x_{k-d+1}^{(p)}\right)\right\|\le(*)$$

Оскільки $s_{iq^*}>\lambda>0, s_{ii}>\lambda>0$, позначимо $s_0=\min\{s_{iq^*},s_{ii}\}>0$. Тоді

$$(*)\le\lambda_{d-1}^{(i,q^*)}\left(\sum_{v,w\in I}\gamma^{(v,w)}\|x_{k-d+1}^{(v)}-x_{k-d+1}^{(w)}\|^2+s_0\|x_{k-d+1}^{(i)}-x_{k-d+1}^{(i)}\|\right).$$

Тут $\sum_{v,w\in I}\gamma^{(v,w)}+s_0\le 1$, а отже $\sum_{v,w\in I}\gamma^{(v,w)}\le 1-s_0\le 1-\lambda$. Отже,

$$\lambda_d=\sum_{p,q\in I}\lambda_d^{(p,q)}\le\sum_{(p,q)\in I,p\ne i,q\ne q^*}\lambda_{d-1}^{(p,q)}+\lambda_{d-1}^{(i,q^*)}\sum_{v,w\in I}\gamma^{(v,w)}\le$$
$$\le 1-\lambda_{d-1}^{(i,q^*)}\lambda\le 1-\lambda^d.$$

Отже, підставивши найдовшу довжину маршруту, отримаємо, що $\lambda_{D_\Gamma}\le 1-\lambda^{D_\Gamma}$. Продовживши дані ітерації, отримаємо, що $\lambda_{n+D_\Gamma}\le\lambda_n(1-\lambda^{D_\Gamma})$.

Підставивши дані співвідношення в ряд, маємо

$$\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\le\sum_{k=0}^{D_\Gamma}\sum_{m=0}^{n}\lambda_{mD_\Gamma+k}\le\sum_{k=0}^{D_\Gamma}\sum_{m=0}^{n}\lambda_k(1-\lambda^{D_\Gamma})^m\to L\in\mathbb{R}.$$

І, нарешті, після підстановки в (7)

$$\sum_{m=0}^{n}\|\bar{x}_m^{(i)}-\bar{x}_m^{(j)}\|^2\le M'\left(\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\right)\left(\sum_{m=0}^{n}\lambda_m\right)\le LM'\left(\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\right),$$

отримаємо умову (5). □

Розглянемо послідовності $(\bar{z}_{n+1}^{(i)})$, які задані рівностями

$$\bar{z}_{n+1}^{(i)}=\frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_k}\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_k\bar{x}_{k-1}^{(i)},\tag{8}$$

де $\bar{x}_{k-1}^{(i)}$ визначається з (2), а (α_n) задовільняє умові 2. Справедлива

Лема 3. *Для довільних i, $j\in I$*

$$\lim_{n\to\infty}\|z_{n+1}^{(i)}-\bar{z}_{n+1}^{(j)}\|=0.$$

Доведення. Зафіксуємо $i,j\in I$. З леми 1.1 і леми 2 випливає існування таких $M_1,M_2>0$, що для довільного $n\in\mathbb{N}$ $\|x_{n+1}^{(i)}-\bar{x}_n^{(j)}\|^2\le M_1$ і $\sum_{k=0}^{n}\|x_{k+1}^{(i)}-\bar{x}_k^{(j)}\|^2/\sum_{k=0}^{n}\alpha_{k+1}\le M_2$. Зафіксуємо $\varepsilon>0$. Умова 2.2 гарантує існування $m_1\in\mathbb{N}$ такого, що $\alpha_n\le\varepsilon\ \forall n\ge m_1$. З умови 2.3 випливає, що для m_1 існує $m_2\in\mathbb{N}$ таке, що

$$\frac{1}{\sum_{k=1}^{m_2}\alpha_k}\sum_{k=1}^{m_1}\alpha_k\|x_k^{(i)}-\bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2\le\frac{M_1}{\sum_{k=1}^{m_2}\alpha_k}\sum_{k=1}^{m_1}\alpha_k\le\varepsilon.$$

Звідси для довільного $n\ge m_2$

$$\frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_k}\sum_{k=1}^{m_1}\alpha_k\|x_k^{(i)}-\bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2\le\varepsilon.$$

Тоді, враховуючи (3), (8) і умову 2.1, отримаємо, що для довільного $n \geq n_0 = \max\{m_1, m_2\}$ виконується

$$\|z_{n+1}^{(i)} - \bar{z}_{n+1}^{(j)}\|^2 = \left\| \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k (x_{k+1}^{(i)} - \bar{x}_k^{(j)}) \right\|^2 \leq$$

$$\leq \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k \|x_k^{(i)} - \bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2 = \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=1}^{m_1} \alpha_k \|x_k^{(i)} - \bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2 +$$

$$+ \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=m_1+1}^{n+1} \alpha_k \|x_k^{(i)} - \bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2 \leq$$

$$\leq \varepsilon + \frac{\alpha_{m_1+1}}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=m_1+1}^{n+1} \alpha_k \|x_k^{(i)} - \bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2 \leq$$

$$\leq \varepsilon + \frac{\varepsilon}{\sum_{k=1}^{n+1} \alpha_k} \sum_{k=m_1+1}^{n+1} \alpha_k \|x_k^{(i)} - \bar{x}_{k-1}^{(j)}\|^2 \leq (1 + M_2)\varepsilon,$$

звідки випливає, що $\lim_{n\to\infty} \|z_{n+1}^{(i)} - \bar{z}_{n+1}^{(j)}\| = 0$. □

Перейдемо, нарешті, до доведення теореми 1.

Доведення теореми 1. Зафіксуємо $i \in I$. З обмеженості послідовності $(z_n^{(i)})$ випливає існування підпослідовності $(z_{n_l}^{(i)})$, що слабко збігається до деякого $z_*^{(i)} \in H$. З опуклості та замкненості множини $C^{(i)}$ випливає, що $z_*^{(i)} \in C^{(i)}$. З леми 3 випливає, що $\bar{z}_n^{(i)} \rightharpoonup z_*^{(i)}$. Водночас для довільного $j \in I \setminus \{i\}$ лема 3 гарантує, що $z_n^{(j)} \rightharpoonup z_*^{(i)}$. При цьому $z_n^{(j)} \subset C^{(j)}$, а отже, враховуючи замкненість $C^{(j)}$, маємо $z_*^{(i)} \in C^{(j)}$, і, узагальнивши, $z_*^{(i)} \in \bigcap_{i\in I} C^{(i)} = C$.

Підставимо послідовність індексів (n_l) в нерівність (4), отримаємо, що для довільних $y \in C$ і $l \in \mathbb{N}$

$$-\frac{\sum_{i\in I} \|\bar{x}_0^{(i)} - y\|^2}{\sum_{k=0}^{n_l-1} \alpha_{k+1}} \leq 2 \sum_{i\in I} \left\langle y - z_{n_l}^{(i)}, A^{(i)}(y) \right\rangle.$$

Перейшовши до границі при $l \to \infty$, і враховуючи умову 2.3, отримаємо, що для довільного $y \in C$

$$0 \leq 2 \sum_{i\in I} \left\langle y - z_*^{(i)}, A^{(i)}(y) \right\rangle = 2 \left\langle y - z_*^{(i)}, \sum_{i\in I} A^{(i)}(y) \right\rangle.$$

Оскільки оператор $\sum_{i\in I} A^{(i)}$ — монотонний і хемінеперервний, то з умови 1.1 ми отримаємо, що

$$0 \leq 2 \left\langle y - z_*^{(i)}, \sum_{i\in I} A^{(i)}(z_*^{(i)}) \right\rangle \quad \forall y \in C,$$

а отже $z_*^{(i)} \in VI(C, \sum_{i\in I} A^{(i)})$.

Оскільки з умов задачі випливає, що $VI(C, \sum_{i\in I} A^{(i)})$ складається з єдиної точки x^*, отримаємо, що для довільного $i \in I$ довільна слабко збіжна підпослідовність $(z_{n_l}^{(i)})$ обмеженої послідовності $(z_n^{(i)})$ слабко збігається до x^* розв'язку задачі 1, а отже $z_n^{(i)} \rightharpoonup x^*$. □

Література

1. Байокки К., Капело А. Вариационные и квазивариационные неравенства. — Москва: Наука, 1988. — 448 с.
2. Киндерлерер Д., Стампаккья Г. Введение в вариационные неравенства и их приложения. — Москва: Мир, 1983. — 256 с.
3. Гольштейн Е. Г., Гольштейн Н. В. Модифицированные функции Лагранжа. Теория и методы оптимизации. — Москва: Наука, 1989. — 400 с.
4. Iiduka H. Decentralized Algorithm for Centralized Variational Inequalities in Network Resource Allocation // J. Optim. Theory Appl. — 2011. — 151. — P. 525–540.
5. Бакушинский А. Б., Гончарский А. В. Некорректные задачи. Численные методы и приложения. — Москва: Изд-во МГУ, 1989. — 200 с.
6. Bruck R. E. On the weak convergence of an ergodic iteration for the solution of variational inequalities for monotone operators in Hilbert space // Journal of Mathematical Analysis and Applications. — 1977. — V. 61. — P. 159–164.
7. Passty G. B. Ergodic Convergence to a Zero of the Sum of Monotone Operators in Hilbert Spaces // Journal of Mathematical Analysis and Applications. — 1979. — V. 72. — P. 383–390.
8. Семенов В. В. О сходимости методов решения двухуровневых вариационных неравенств с монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — №1(101). — С. 120–128.
9. Войтова Т. А., Семенов В. В. Метод решения двухэтапных операторных включений // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — № 3(102). — С. 34–39.
10. Маліцький Ю. В., Семенов В. В. Нові теореми сильної збіжності проксимального методу для задачі рівноважного програмування // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — № 3(102). — С. 79–88.
11. Денисов С. В., Семенов В. В. Проксимальний алгоритм для дворівневих варіаційних нерівностей: сильна збіжність // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2011. — №3(106). — С. 27–32.
12. Lyashko S. I., Semenov V. V., Voitova T. A. Low-cost modification of Korpelevich's methods for monotone equilibrium problems // Cybernetics and Systems Analysis. — 2011. — V. 47, №4. — P. 631–639.
13. Апостол Р. Я., Гриненко А. А., Семенов В. В. Ітераційні алгоритми для монотонних дворівневих варіаційних нерівностей // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2012. — №1(107). — С. 3–14.
14. Семенов В. В., Чабак Л. М. Новий варіант регуляризації методів екстраградієнтного типу // Доповіді НАН України. — 2014. — №10. — С. 45–50.
15. Malitsky Yu. V., Semenov V. V. A hybrid method without extrapolation step for solving variational inequality problems // Journal of Global Optimization. — 2015. — V. 61. — Issue 1. — P. 193–202
16. Malitsky Yu. V., Semenov V. V. An extragradient algorithm for monotone variational inequalities // Cybernetics and Systems Analysis. — 2014. — V. 50, №2. — P. 271–277.

17. Lions P. L., Mercier B. Splitting algorithms for the sum of two nonlinear operators // SIAM J. Numer. Anal. — 1979. — V. 16, №6. — P. 964–979.
18. Nedic A., Bertsekas D. P. Incremental subgradient methods for nondifferentiable optimization // SIAM J. Optim. — 2001. — V. 12, №1. — P. 109–138.
19. Bertsekas D. P. Incremental proximal methods for large scale convex optimization // Math. Program., Ser. B. — 2011. — V. 129. — P. 163–195.
20. Semenov V. V. A Strongly Convergent Splitting Method for Systems of Operator Inclusions with Monotone Operators // Journal of Automation and Information Sciences. — 2014. — V. 46, №5. — P. 45–56.
21. Semenov V. V. Hybrid Splitting Methods for the System of Operator Inclusions with Monotone Operators // Cybernetics and Systems Analysis. — 2014. — V. 50, №5. — P. 741–749.
22. Semenov V. V. On the Parallel Proximal Decomposition Method for Solving the Problems of Convex Optimization // Journal of Automation and Information Sciences. — 2010. — V. 42, №4. — P. 14–18.
23. Денисов С. В. Параллельная схема декомпозиции для поиска седловой точки и равновесия Нэша // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2010. — №3(102). — С. 40–48.
24. Семенов В. В. Параллельная декомпозиция вариационных неравенств с монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2012. — №2(108). — С. 53–58.
25. Семенов В. В. Явный алгоритм расщепления для вариационных неравенств с монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2013. — №2(112). — С. 42–52.
26. Семенов В. В. Параллельная декомпозиция операторных включений с максимальными монотонными операторами // Журнал обчисл. та прикл. матем. — 2013. — №2(112). — С. 155–160.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна,
e-mail: sigi_grebe@list.ru

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ, 01601, Україна,
e-mail: hirurg123@gmail.com

Київська державна академія водного транспорту ім. гетьмана Петра Конашевича-Сагайдачного, вул. Фрунзе, 9, Київ, 04071, Україна, e-mail: lyu_bov1@mail.ru

Надійшла 25.10.2014

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, №1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.9

ФРАГМЕНТАЛЬНИЙ ПІДХІД ДО РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ПРОГНОЗУВАННЯ ТРЕТИННОЇ СТРУКТУРИ МОЛЕКУЛИ ПРОТЕЇНУ

В. О. Рудик

Резюме. В роботі запропоновано популяційний алгоритм для розв'язання задачі прогнозування третинної структури протеїнів. Специфікою алгоритму є фрагментарний підхід до побудови структур молекул, що дозволяє проводити пошук в просторі допустимих розв'язків уникаючи недопустимих варіантів з врахуванням особливостей задачі. Ефективність розглянутої процедури підвищується за рахунок використання у ній схем локального пошуку.

Вступ

Проблема прогнозування третинної структури молекули протеїну актуальна в сферах молекулярної біології, біохімії, генетики, фармакології. Можливість передбачувати структуру протеїнів є ключем до розуміння їх впливу на організм, схем виникнення багатьох хвороб, і часто знаходження шляхів їх лікування. В математичному плані зазначена проблема у більшості випадків моделюється задачею пошуку такої ламаної лінії (згортки) без самоперетину, яка проходить по вузлам вибраної решітки і доставляє мінімум цільовій функції задачі.

Основним правилом, яким керуються при дослідженні білків, є доктрина "Послідовність-структура-функціональність". Вважається, що функції, які виконуються тим чи іншим білком, залежать від його форми у просторі — третинної структури. Третинна структура ж, в свою чергу, однозначно визначається будовою білка — послідовністю амінокислот, що являє собою первинну структуру протеїну. Однією з моделей, що використовується для прогнозування форми молекули протеїну математичними методами є гідрофобно-полярна модель Ділла [1]. Відповідно до неї амінокислоти в залежності від своїх властивостей поділяються на два класи — гідрофобні і полярні. Первинна структура подається у формі послідовності елементів з множини {H, P}, де H позначає гідрофобну амінокислоту, а P — полярну. Структура молекули подається у вигляді шляху без самоперетинів у деякій дискретній решітці, кожна амінокислота розташована в певному вузлі решітки, сусідні в послідовності амінокислоти — в сусідніх вузлах. Вважається, що однією з основних сил, які впливають на формування структури молекули, є зв'язки (H-H контакти), що утворюються між гідрофобними залишками, розташованими поруч, в дискретній моделі — в сусідніх вузлах

решітки. Енергія структури в моделі Ділла підраховується як кількість H-H контактів у ній зі знаком мінус. Вважається, що молекула прийме ту форму, в якій її енергія мінімальна. Таким чином постає задача комбінаторної оптимізації. Доведено, що ця задача є NP-складною [2].

Для розв'язання задачі прогнозування третинної структури молекули протеїну застосовувались алгоритми мурашиних колоній [3, 4], генетичні алгоритми [5, 6], алгоритми детермінованого та стохастичного локального пошуку [7, 8]. Специфіка задачі полягає в тому, що умова допустимості згортки, а саме відсутність в ній самоперетинів, є достатньо жорсткою. При цьому, враховуючи, що структури з низькою енергією є достатньо компактними за рахунок великої кількості гідрофобних зв'язків у них, кількість допустимих згорток в їх околі є малою. Проте, можна показати, що множина допустимих розв'язків з введеним поняттям околу у ній є зв'язною.

За показником співвідношення оптимальності знайденого розв'язку до часу, затраченого на його пошук, ефективними виявились алгоритми локального пошуку. Зокрема це пояснюється тим, що вони, на відміну від алгоритмів, в яких використовується послідовна процедура побудови згортки, не приходять до тупикових варіантів. Це спонукає до розробки алгоритму, який буде максимально використовувати в собі процедуру локального пошуку, але при цьому застосовувати диверсифікацію пошуку для аналізу усього простору допустимих розв'язків.

2. Опис алгоритму

Алгоритм, що пропонується в роботі, є популяційним, тобто він на кожній ітерації оперує відразу з декількома розв'язками. Ідея полягає в тому, що на кожному кроці проводиться пошук у околі більш перспективних (відповідно до значення фітнес-функції) розв'язків. Для цього буде використовуватись відбір з повтореннями. Таким чином згортки з більш низьким значенням енергії з високою ймовірністю потраплять в нову популяцію у декількох копіях, кожна з яких на заданій ітерації замінюється на іншу згортку з її околу з достатньо низьким значенням енергії (таку заміну надалі будемо називати мутацією, процедура мутації буде розглянута нижче). Якщо ж такої структури не знайдено, проводиться диверсифікація пошуку — задана структура замінюється на іншу, яка генерується випадково.

У такій схемі важливим є адекватне визначення фітнес-функції. Адже якщо її значення буде залежати лише від енергії згортки, нові структури будуть витіснені тими, що були побудовані в результаті більшої кількості ітерацій. Це спонукає до введення поняття віку згортки, яке визначимо наступним чином: при додаванні випадкової структури в популяцію її вік вважатимемо 0; при мутації вік мутованої структури збільшується на одиницю. При відборі елементів у нову популяцію у фітнес-функції враховутиметься не тільки енергія структури, але й її вік.

Ще однією особливістю алгоритму є процедура мутації структури. Тут прийнято до уваги той факт, що чим довша амінокислотна послідовність, тим більша в її околі частка недопустимих структур. Тому при побудові структури доречно формувати її фрагментами, позиціонуючи в решітці

спочатку центральні елементи, потім поступово додавати решту. На першій ітерації популяція заповнюється випадковими згортками фіксованої довжини, меншої, ніж довжина амінокислотної послідовності. Далі, коли задана частина згортки буде побудована, до всіх елементів популяції з обох сторін додається по одному амінокислотному залишку в випадковому напрямку. Для ефективного пошуку структур з низьким значенням енергії в алгоритмі використовується Гауссівський розподіл, параметри якого змінюються від ітерації до ітерації. Цей розподіл задає ймовірність, з якою заданий елемент згортки буде змінено в процесі мутації. Параметри розподілу змінюються таким чином, що ймовірність вибору центральних елементів у згортці зменшується при збільшенні ітерації. Сама ж процедура мутації полягає в пошуку структури з нижчою енергією в околі заданого варіанту згортки.

3. Схема алгоритму

Обчислювальна схема алгоритму подана на рис. 1. На першому кроці алгоритму процедурою *ІніціалізуватиПараметриРозподілу*() встановлюються параметри розподілу, що буде використовуватись алгоритмом при мутації розв'язків. Розподіл задаватиме ймовірність, з якою відповідний елемент згортки буде змінюватись. У якості функції щільності розподілу пропонується взяти нормовану суму двох функцій щільності Гауссівського розподілу з середніми значеннями, симетричними відносно середини молекули:

$$\bar{f}(x) = 0.5(f(x, n/2 - M, \sigma) + f(x, n/2 + M, \sigma)$$

де M та σ — параметри розподілу, а f позначає функцію щільності Гауссівського розподілу. Початкове значення для M встановлюється рівним 0, початкове значення σ є параметром алгоритму. Параметри M та σ будуть змінюватись в процесі роботи процедури.

Ще одним параметром алгоритму є довжина фрагментів згорток l, що будуються на першій ітерації. Відповідно до правила трьох сигм, індекси, що генеруватимуться відповідно до введеного розподілу, з ймовірністю, більшою 0.997 будуть лежати в діапазоні $(n/2 - 3\sigma, n/2 + 3\sigma)$, тому доречно обрати $l = 6\sigma$.

Наступним кроком алгоритму є генерація початкової популяції. Процедура *ЗгенеруватиПочатковуПопуляцію*() випадковим чином генерує популяцію згорток довжиною l.

Оптимальне знайдене значення розв'язку будемо позначати символом s.

Для кожного розв'язку в популяції зберігатиметься його вік — кількість ітерацій, впродовж яких цей розв'язок існує в популяції. На першому кроці вік кожного розв'язку встановлюється рівним 0.

Далі запускається ітераційна процедура, яка зупиниться, коли буде виконуватись умова завершення. Процедура *ВиконуєтьсяУмоваЗавершення*() може базуватись на кількості кроків, впродовж яких оптимальний розв'язок не змінювався, але при цьому має виконуватись рівність $l = n$. При умові $l < n$ згортка, побудована алгоритмом, не буде повною.

На кожній ітерації алгоритму обчислюється вага всіх елементів популяції: чим нижче значення енергії розв'язку, тим вища його вага. В розробленому алгоритмі пропонується обрати вагу рівною значенню енергії зі знаком мінус.

```
procedure textitФрагментальнаСхема()
    ІніціалізуватиПараметриРозподілу()
    P = ЗгенеруватиПочатковуПопуляцію()
    s = ОптимальнийРозв'язок(P)
    foreach p є P:
        Вік[p] = 0
    while not ВиконуєтьсяУмоваЗавершення():
        foreach p є P:
            Вага[p] = ОбчислитиВагу(p)
        P' = ВідбірЗПовтореннями (P, Вік, Вага)
        if НеобхідноРозширювати():
            foreach p є P':
                if Довжина(p)<n:
                    if МожнаРозширити(p):
                        p = Розширити(p)
                    else:
                        p = ВипадковаЗгортка()
                        Вік[p] = 0
            ПоновитиПараметриРозподілу()
        foreach p є P':
            if ВдалаМутація(p, p'):
                p=p'
                Вік[p] = Вік[p]+1
            else:
                p = ВипадковаЗгортка()
                Вік[p] = 0
        P = P'
        s = ОптимальнийРозв'язок(P ∪ {s})
    return S
```

Рис 1. Схема алгоритму

Наступним кроком проводиться відбір нової популяції. Процедура відбору є стохастичною, ймовірність вибрати певний елемент залежить від його ваги (чим більша вага, тим більша ймовірність) і віку (чим менший вік, тим більша ймовірність). В запропонованій реалізації алгоритму ймовірність обрати елемент пропорційна значенню ваги — віку з додаванням одиниці.

Далі проводиться перевірка, чи доречно проводити розширення згорток, тобто збільшувати довжину елементів популяції. Найпростіший варіант —

проводити розширення кожні k ітерацій (k — параметр алгоритму). Адаптивна реалізація може враховувати середнє значення енергії і вік популяції на заданій ітерації.

Розширення проводиться в два кроки — добудова структур та зміна параметрів розподілу. Під добудовою структур в популяції мається на увазі додання по одному амінокислотному залишку в початок і кінець заданої згортки у випадковому напрямку (за умови, що $l < n$). Якщо допустимої згортки таким чином згенерувати не вдалося, то вона замінюється на випадкову відповідної довжини, її вік встановлюється нульовим.

Функція *ПоновитиПараметриРозподілу*() поновлює значення параметрів M, σ та l таким чином, щоб індекси елементів, що найбільш ймовірно будуть підлягати зміні в структурі, рухались від середини згортки до її країв в процесі роботи алгоритму. Значення параметру l збільшується відповідно до довжини елементів в популяції (на 2, якщо $l < n$, або не змінюється в іншому випадку). Значення M та σ теж збільшуються на фіксовані величини; в запропонованій реалізації алгоритму M інкрементується на 1, σ не змінюється.

Останнім кроком ітерації є мутація. Її схема наведена на рис. 2.

```
ВдалаМутація(p, p')
    while not ВиконуєтьсяУмоваЗавершенняМутації()
        p'=p
        i = ОбратиІндекс()
        foreach можливих напрямків d:
        p'[i]=d
        if E(p')<E(p):
            return 1
    return 0
```

Рис 2. Схема процедури мутації

Процедура мутації є ітеративною. Функція *ВиконуєтьсяУмоваЗавершенняМутації*() в найпростішій реалізації базується на кількості кроків, які було виконано. Функція *ОбратиІндекс*() повертає випадкове значення відповідно до введеного розподілу. Далі, елемент згортки на позиції, що задана обраним індексом, послідовно замінюється на кожен елемент кодування, і, якщо найменша енергія зі знайдених, нижча за енергію початкової структури, відповідна згортка повертається функцією, вважається, що процедура мутації пройшла успішно. Якщо ж таку структуру знайти не вдалось, повертається значення 0.

4. Результати та висновки

Запропонований алгоритм було реалізовано та апробовано на задачах з бібліотеки Protein Data Bank. Наступними кроками досліджень є налаштування параметрів алгоритму для досягнення найвищих показників ефективності і порівняння результатів прогнозування з результатами інших існуючих алгоритмів.

Література

1. Dill K. A. Theory for the folding and stability of globular proteins. // Biochemistry. — 1985. — №24(6). — P. 1501–1509.
2. Unger R, Moult J. Finding the lowest free energy conformation of a protein is an NP-hard problem: proof and implications. // Bulletin of Mathematical Biology. — 1993. — №55(6). — P. 1183–1198.
3. Fidanova S., Lirkov I. Ant Colony System Approach for Protein Folding. // Int. Conf. Multiconference on Computer Science and Information Technology. — 2008. — P. 887–891.
4. Гуляницкий Л. Ф., Рудык В. А. Проблема предсказания структуры протеина: формализация с использованием кватернионов. // Кибернетика и системный анализ. — 2013. —№4. — С.130–137.
5. Shehu, A., De Jong, K. Evolutionary Algorithms for Protein Structure Modeling. // Proceedings of the Companion Publication of the 2015 on Genetic and Evolutionary Computation Conference. — 2015. P. 533–545.
6. Custodio F. L., Helio B., Laurent E. D. A multiple minima genetic algorithm for protein structure prediction. // Applied Soft Computing. — 2014. — №15. — P. 88–99.
7. Abu D. U., Steinhofel K. A hybrid approach to protein folding problem integrating constraint programming with local search. // BMC bioinformatics. — 2010. —№11(1). — S39.
8. Frausto-Solis J. Threshold temperature tuning Simulated Annealing for Protein Folding Problem in small peptides. // Computational and Applied Mathematics. — 2013. — №32(3). — P. 471–482.

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, пр. Академіка Глушкова, 40, Київ, 03680 МСП, Україна.

Надійшла 09.11.2014

УДК 519.71

КОВАРІАЦІЙНА МАТРИЦЯ ОЦІНКИ ПАРАМЕТРІВ ЛІНІЙНОЇ РЕГРЕСІЙНОЇ МОДЕЛІ З ОБМЕЖЕННЯМИ НА ПАРАМЕТРИ

М. Ю. Савкіна

Резюме. В роботі знайдено в явному вигляді коваріаційну матрицю оцінки параметрів лінійної регресійної моделі з обмеженнями на параметри в вигляді рівностей у випадку, коли кількість обмежень на одиницю менше кількості параметрів. Невідомі параметри моделі оцінюються за методом найменших квадратів.

Abstract. Covarience matrix of equality constrained estimation of parameters of linear regression model is found in explicit form when the number of restrictions on the number one less parameters in the paper. The unknown model parameters are estimated by the method of least squares.

1. Вступ

Розглянемо модель лінійної регресії

$$y_i = f(t_i) + \xi_i, \qquad i = 0, 1, ..., n, \tag{1}$$

де $\xi_0, ..., \xi_n$ — незалежні у сукупності випадкові величини з $E\xi_i = 0$ та $D\xi_i = \sigma^2$, а функцію регресії $f(t)$ можна подати у вигляді:

$$f(t) = a_0 x_0(t) + a_1 x_1(t) + ... + a_{k-1} x_{k-1}(t), \tag{2}$$

де $a_0,\ a_1, ...,\ a_{k-1}$ невідомі параметри, які підлягають оцінюванню; $x_0(t)$, $x_1(t), ..., x_{k-1}(t)$ — базисні функції.

Найпоширенішим методом оцінювання невідомих параметрів в регресійному аналізі є метод найменших квадратів (МНК), який полягає в мінімізації суми

$$\sum_{i=0}^{n} \xi_i^2$$

відносно вектора $\vec{a} = (a_0, a_1, ..., a_{k-1})^T$.

Позначимо

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ . \\ . \\ . \\ y_n \end{pmatrix}; \qquad X = \begin{pmatrix} x_0(t_0) & x_1(t_0) & ... & x_{k-1}(t_0) \\ x_0(t_1) & x_1(t_1) & ... & x_{k-1}(t_1) \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ x_0(t_n) & x_1(t_n) & ... & x_{k-1}(t_n) \end{pmatrix}.$$

Тоді оцінка МНК $\hat{a}_0, \hat{a}_1, ..., \hat{a}_{k-1}$ параметрів $a_0, a_1, ..., a_{k-1}$ матиме вигляд [1]

$$\vec{a}^{(\wedge)} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}, \tag{3}$$

де

$$\vec{a}^{(\wedge)} = (\hat{a}_0, \hat{a}_1, ..., \hat{a}_{k-1})^T,$$

а її матриця коваріацій

$$cov(\vec{a}^{(\wedge)}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1}.$$

Теорема Гауса-Маркова [1] стверджує незміщеність та ефективність оцінки $\vec{a}^{(\wedge)}$ в класі незміщених оцінок, лінійних по $\vec{y}$.

В класичній регресії передбачається, що на вектор невідомих параметрів не накладено ніяких обмежень. Це значить, що $\Theta = R^k$, де Θ — множина апріорних значень вектора $\vec{a}$. Іноді деяка інформація все-таки існує. Апріорні обмеження можуть виступати в вигляді лінійних рівнянь або нерівностей з відомими коефіцієнтами відносно $a_0,\ a_1, ...,\ a_{k-1}$. В цьому випадку оцінка МНК буде відрізнятися від звичайної.

2. Регресія з обмеженнями на параметри в вигляді рівностей

Припустимо тепер, що апріорна множина Θ не збігається з усім простором R^k, а є лише його частиною. Розглянемо випадок, коли Θ являє собою гіперплощину в R^k розмірності $q \leq k-1$. Це значить, що на вектор невідомих параметрів накладено q лінійно-незалежних обмежень у вигляді рівнянь з відомими коефіцієнтами, тобто вектор $\vec{a}$ задовільняє співвідношенню

$$R\vec{a} = \vec{r}, \tag{4}$$

де

$$R = \begin{pmatrix} r_{10} & r_{11} & ... & r_{1,k-1} \\ r_{20} & r_{21} & ... & r_{2,k-1} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ r_{q0} & r_{q1} & ... & r_{q,k-1} \end{pmatrix}, \quad rang\ R = q; \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ . \\ . \\ . \\ r_q \end{pmatrix}.$$

Матриця R та вектор $\vec{r}$ задани.

Згідно з [1] оцінка, що мінімізує суму квадратів відхилень при обмеженнях на параметри в вигляді рівностей для регресії (1), (2) при обмеженнях (4) матиме вигляд

$$\vec{a}_R^{(\wedge)} = \vec{a}^{(\wedge)} + (X^T X)^{-1} R^T S (\vec{r} - R\vec{a}^{(\wedge)}), \tag{5}$$

де

$$S = \left(R(X^T X)^{-1} R^T\right)^{-1},$$

а її матриця коваріацій

$$cov(\vec{a}_R^{(\wedge)}) = \sigma^2 (X^T X)^{-1} \left[I_k - R^T S R (X^T X)^{-1}\right], \tag{6}$$

де I_k — одинична матриця $k-$ го порядку.

Незміщеність та лінійну ефективність оцінки $\vec{a}_R^{(\wedge)}$ доведено в [2].

Моделі з обмеженнями на параметри в вигляді рівностей використовуються для побудови важливих статистичних критеріїв перевірки гіпотез [2] про оцінки параметрів моделі та про модель в цілому.

В загальному випадку такий критерій перевіряє істотність обмежень на параметри вигляду (4). Гіпотеза H_0 полягає в тому, що обмеження (4) істотні. Для того, щоб прийняти або відхилити дану гіпотезу, знаходимо оцінки МНК (3) та (5) та суми квадратів відхилень

$$s_1 = (\vec{y} - X\vec{a}^{(\wedge)})^T(\vec{y} - X\vec{a}^{(\wedge)}), \quad s_2 = (\vec{y} - X\vec{a}_R^{(\wedge)})^T(\vec{y} - X\vec{a}_R^{(\wedge)}).$$

Далі, з таблиць [3] для заданого рівня значущості λ знаходимо критичне значення $F_\lambda(q, n-k-1)$ критерія Фішера, яке залежить від λ, кількості спостережень n, кількості обмежень q, кількості факторів в регресії k. Якщо

$$\frac{(s_2 - s_1)(n-k-1)}{s_1 q} < F_\lambda(q, n-k-1),$$

гіпотезу H_0 відхиляємо, інакше приймаємо.

Частинними випадками критерію перевірки істотності обмежень є:

1) перевірка сумісної значущості частини факторів в моделі (розглядається гіпотеза про те, що коефіцієнти при деяких факторах не відрізняються від нуля);

2) RESET-тест Рамсея [4] (перевіряється гіпотеза про те, що зв'язок між залежною та незалежною змінними дійсно лінійний);

3) тест Бреуша-Годфрі [4] (перевіряється гіпотеза про те, що відсутня автокореляція залишків);

4) тест Чоу [4],[5] (перевіряється гіпотеза про те, що параметри моделі сталі для всіх спостережень).

В роботі [6] знайдено в явному вигляді коваріаційну матрицю (6) у випадку $k = 3$ та $q = 1, 2$.

3. Коваріаційна матриця оцінки параметрів моделі в випадку $q = k - 1$.

Припустимо тепер, що $q = k - 1$, тобто надалі будемо вважати, що

$$R = \begin{pmatrix} r_{10} & r_{11} & \dots & r_{1,k-1} \\ r_{20} & r_{21} & \dots & r_{2,k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ r_{k-1,0} & r_{k-1,1} & \dots & r_{k-1,k-1} \end{pmatrix}, \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{k-1} \end{pmatrix}.$$

Виходячи з формули (6), знайдемо матрицю коваріацій $cov(\vec{a}_R^{(\wedge)})$ для даного випадку в явному вигляді.

Подамо матрицю S^{-1} у вигляді

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} \vec{r}_1(X^TX)^{-1}\vec{r}_0 & \vec{r}_1(X^TX)^{-1}\vec{r}_2 & ... & \vec{r}_1(X^TX)^{-1}\vec{r}_{k-1} \\ \vec{r}_2(X^TX)^{-1}\vec{r}_1 & \vec{r}_1(X^TX)^{-1}\vec{r}_2 & ... & \vec{r}_2(X^TX)^{-1}\vec{r}_{k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \vec{r}_{k-1}(X^TX)^{-1}\vec{r}_1 & \vec{r}_{k-1}(X^TX)^{-1}\vec{r}_2 & ... & \vec{r}_{k-1}(X^TX)^{-1}\vec{r}_{k-1} \end{pmatrix},$$

де

$$\vec{r}_i = \begin{pmatrix} r_{i0} \\ r_{i1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{i,k-1} \end{pmatrix}, i = 1, 2, ..., k-1.$$

Позначимо Δ та δ визначники матриць S^{-1} та X^TX відповідно.

Має місце наступна теорема.

Теорема 1. *Нехай*

$$R^{(0)} = \begin{pmatrix} r_{11} & ... & r_{1,k-1} \\ r_{21} & ... & r_{2,k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ r_{k-1,1} & ... & r_{k-1,k-1} \end{pmatrix}, \quad R^{(k-1)} = \begin{pmatrix} r_{10} & ... & r_{1,k-2} \\ r_{20} & ... & r_{2,k-2} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ r_{k-1,0} & ... & r_{k-1,k-2} \end{pmatrix},$$

$$R^{(m)} = \begin{pmatrix} r_{10} & ... & r_{1,m-1} & r_{1,m+1} & ... & r_{1,k-1} \\ r_{20} & ... & r_{2,m-1} & r_{2,m+1} & ... & r_{2,k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ r_{k-1,0} & ... & r_{k-1,m-1} & r_{k-1,m+1} & ... & r_{k-1,k-1} \end{pmatrix},$$

$$m = 1, 2, ..., k-2.$$

Тоді

$$cov(\vec{a}_R^{(\wedge)}) = (\Delta\delta)^{-1}\cdot$$

$$\cdot \begin{pmatrix} |R^{(0)}|^2 & -|R^{(0)}||R^{(1)}| & ... & (-1)^{k-1}|R^{(0)}||R^{(k-1)}| \\ -|R^{(1)}||R^{(0)}| & |R^{(1)}|^2 & ... & (-1)^{k}|R^{(1)}||R^{(k-1)}| \\ |R^{(2)}||R^{(0)}| & -|R^{(2)}||R^{(1)}| & ... & (-1)^{k+1}|R^{(2)}||R^{(k-1)}| \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ (-1)^{k-1}|R^{(k-1)}||R^{(0)}| & (-1)^{k}|R^{(k-1)}||R^{(1)}| & ... & |R^{(k-1)}|^2 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

де $|R^{(i)}|,\ i = 0, 2, ..., k-1,-$ *визначник матриці* $R^{(i)}$.

Доведення. Позначимо $\vec{\gamma}^{(j)} = (\gamma_1^{(j)}, \gamma_2^{(j)}, ..., \gamma_{k-1}^{(j)}),\ j = 0, 1, ..., k-1,-$ розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$S^{-1}\vec{\gamma} = \vec{r}_j^{(\perp)},$$

де

$$\vec{r}_j^{(\perp)} = \begin{pmatrix} r_{1j} \\ . \\ . \\ . \\ r_{k-1,j} \end{pmatrix}, j = 0, 1, ..., k-1.$$

В цих позначеннях матрицю $R^T SR$ можна подати у вигляді

$$R^T SR = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{k-1} r_{i0}\gamma_i^{(0)} & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i0}\gamma_i^{(1)} & ... & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i0}\gamma_i^{(k-1)} \\ \sum_{i=1}^{k-1} r_{i1}\gamma_i^{(0)} & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i1}\gamma_i^{(1)} & ... & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i1}\gamma_i^{(k-1)} \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ \sum_{i=1}^{k-1} r_{i,k-1}\gamma_i^{(0)} & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i,k-1}\gamma_i^{(1)} & ... & \sum_{i=1}^{k-1} r_{i,k-1}\gamma_i^{(k-1)} \end{pmatrix}.$$

Далі, елементи матриць $(X^T X)^{-1}$ та $R^T SR(X^T X)^{-1}$ позначимо $\bar{x}_{lm}$ та $\nu_{lm},\ l, m = 0, 1, ..., k-1$, відповідно.

Знайдемо $\nu_{lm},\ l, m = 0, 1, ..., k-1$. Маємо

$$\nu_{lm} = \left(\sum_{i=1}^{k-1} r_{il}\gamma_i^{(0)}\right)\bar{x}_{0m} + \left(\sum_{i=1}^{k-1} r_{il}\gamma_i^{(1)}\right)\bar{x}_{1m} + ... + \left(\sum_{i=1}^{k-1} r_{il}\gamma_i^{(k-1)}\right)\bar{x}_{k-1,m} =$$

$$= r_{1l}\left(\sum_{i=0}^{k-1}\gamma_1^{(i)}\bar{x}_{im}\right) + r_{2l}\left(\sum_{i=0}^{k-1}\gamma_2^{(i)}\bar{x}_{im}\right) + ... + r_{k-1,l}\left(\sum_{i=0}^{k-1}\gamma_{k-1}^{(i)}\bar{x}_{im}\right) =$$

$$= \Delta^{-1}\big(r_{1l}\Delta_1^{(m)} + r_{2l}\Delta_2^{(m)} + ... + r_{k-1,l}\Delta_{k-1}^{(m)}\big),$$

де $\Delta_p^{(m)},\ p = 1, 2, ..., k-1,-$ визначник матриці, яка утворена з матриці S^{-1} заміною $p-$го стовпця на стовпець

$$\vec{v}_m = \begin{pmatrix} v_{1m} \\ v_{2m} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{k-1,m} \end{pmatrix}, \quad v_{jm} = \sum_{i=0}^{k-1} r_{ji}\bar{x}_{im}, \quad j = 1, 2, ..., k-1.$$

Нехай

$$\Omega_0 = \begin{pmatrix} v_{11} & ... & r_{1,k-1} \\ v_{21} & ... & v_{2,k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{k-1,1} & ... & v_{k-1,k-1} \end{pmatrix}, \quad \Omega_{k-1} = \begin{pmatrix} v_{10} & ... & v_{1,k-2} \\ v_{20} & ... & v_{2,k-2} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{k-1,0} & ... & v_{k-1,k-2} \end{pmatrix},$$

$$\Omega_p = \begin{pmatrix} v_{10} & ... & v_{1,p-1} & v_{1,p+1} & ... & v_{1,k-1} \\ v_{20} & ... & v_{2,p-1} & v_{2,p+1} & ... & v_{2,k-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ v_{k-1,0} & ... & v_{k-1,p-1} & r_{k-1,p+1} & ... & v_{k-1,k-1} \end{pmatrix},\ p = 1, 2, ..., k-2.$$

Після низки перетворень отримаємо

$$r_{1l}\Delta_1^{(m)} + r_{2l}\Delta_2^{(m)} + ... + r_{k-1,l}\Delta_{k-1}^{(m)} = (-1)^{m+l+1}\sum_{p=0,\ p\neq m}^{k-1}\big|R_p^{(m,l)}\big|\cdot\big|\Omega_p\big|,$$

де $\big|R_p^{(m,l)}\big|$ — визначник матриці $R_p^{(m,l)}, p = 0, ..., m-1, m+1, ..., k-1$, яка утворена з матриці $R^{(m)}$ заміною стовпця $\vec{r}_p^{\,(\perp)}$ на стовпець $\vec{r}_l^{\,(\perp)}$, а $\big|\Omega_p\big|-$ визначник матриці $\Omega_p,\ p = 0, 1, ..., k-1$.

Розглянемо випадок $m \neq l$. Якщо $p \neq l$, то $\big|R_p^{(m,l)}\big| = 0$. Отже,

$$r_{1l}\Delta_1^{(m)} + r_{2l}\Delta_2^{(m)} + ... + r_{k-1,l}\Delta_{k-1}^{(m)} = (-1)^{m+l+1}\big|R_l^{(m,l)}\big|\cdot\big|\Omega_l\big|.$$

У випадку $m = l$ отримаємо

$$r_{1l}\Delta_1^{(l)} + r_{2l}\Delta_2^{(l)} + ... + r_{k-1,l}\Delta_{k-1}^{(l)} = \sum_{p=0,\ p\neq l}^{k-1} \left|R_p^{(l,l)}\right| \cdot \left|\Omega_p\right| = \Delta - \left|R_l^{(l,l)}\right| \cdot \left|\Omega_l\right|.$$

$$l = 0, 1, ..., k-1.$$

Помітимо, що $R_l^{(m,l)} = R^{(m)}$. Маємо

$$\left|\Omega_l\right| = \left|R^{(0)}\right| \cdot \bar{X}_{0l} + \left|R^{(1)}\right| \cdot \bar{X}_{1l} + ... + \left|R^{(k-1)}\right| \cdot \bar{X}_{k-1,l},$$

де $\bar{X}_{il}, i = 0, 1, ..., k-1$, — алгебраїчне доповнення до елементу $\bar{x}_{il}$ матриці $(X^TX)^{-1}$. Позначимо через x_{lm} елементи матриці X^TX. Тоді

$$\left|\Omega_l\right| = \delta^{-1}\big((-1)^l\left|R^{(0)}\right|\cdot x_{0l} + (-1)^{l+1}\left|R^{(1)}\right|\cdot x_{1l} + ... + (-1)^{l+k-1}\left|R^{(k-1)}\right|\cdot x_{k-1,l}\big).$$

Таким чином,

$$\nu_{ll} = 1 - \Delta^{-1}\left|R^{(l)}\right| \cdot \left|\Omega_l\right|,\ l = 0, 1, ..., k-1;$$

$$\nu_{lm} = (-1)^{m+l+1}\Delta^{-1}\left|R^{(m)}\right| \cdot \left|\Omega_l\right|,\ l, m = 0, 1, ..., k-1,\ \text{якщо } m \neq l.$$

Насамкінець, знайдемо елементи матриці $(X^TX)^{-1}\big[I_k - R^TSR(X^TX)^{-1}\big]$. Позначимо їх через $\mu_{lm},\ l, m = 0, 1, ..., k-1$.

Маємо

$$\mu_{lm} = \sum_{i=0,\ i\neq m}^{k-1} \bar{x}_{li}(-\nu_{im}) + \bar{x}_{lm}(1 - \nu_{mm}) = \Delta^{-1}\left|R^{(m)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+i}\bar{x}_{li}\left|\Omega_i\right|.$$

Далі,

$$\sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+i}\bar{x}_{li}\left|\Omega_i\right| = \delta^{-1}\Bigg(\left|R^{(0)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+2i}\bar{x}_{li}x_{0i} +$$

$$+\left|R^{(1)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+2i+1}\bar{x}_{li}x_{1i} + ... + \left|R^{(k-1)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+2i+k-1}\bar{x}_{li}x_{k-1,i}\Bigg) =$$

$$= \delta^{-1}(-1)^m\Bigg(\left|R^{(0)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{0i} - \left|R^{(1)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{1i} + ... - (-1)^k\left|R^{(k-1)}\right| \sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{k-1,i}\Bigg).$$

Помітимо, що сума $\sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{ji}$ є добуток l-го рядка матриці $(X^TX)^{-1}$ на j-й стовпець матриці X^TX. Оскільки $(X^TX)^{-1}X^TX = I_k$, то

$$\sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{ji} = 0,\ l, j = 0, 1, ..., k-1, j \neq l;$$

$$\sum_{i=0}^{k-1}\bar{x}_{li}x_{li} = 1,\ l = 0, 1, ..., k-1.$$

Отже,

$$\sum_{i=0}^{k-1}(-1)^{m+i}\bar{x}_{li}\big|\Omega_i\big| = \delta^{-1}(-1)^{m+l}\big|R^{(l)}\big|,$$

звідки випливає, що

$$\mu_{lm} = (-1)^{m+l}(\delta\Delta)^{-1}\big|R^{(m)}\big|\big|R^{(l)}\big|.$$

Таким чином, отримали формулу (7).

Теорему 1 доведено.

Висновки

В роботі доведено теорему, яка дає в явному вигляді коваріаційну матрицю оцінки параметрів лінійної регресійної моделі з обмеженнями на параметри в вигляді рівностей у випадку, коли кількість обмежень на одиницю менше кількості параметрів. Невідомі параметри моделі оцінюються за методом найменших квадратів. З теореми випливає, що шукана коваріаційна матриця є добуток числа $(\delta\Delta)^{-1}$ на матрицю, елементи якої залежать тільки від матриці обмежень на параметри R. Коефіцієнт $(\delta\Delta)^{-1}$ залежить від матриць R та X.

Література

1. Демиденко Е. З. Линейная и нелинейная регрессии. — Москва: Финансы и статистика, 1981. — 304 с.
2. Рао С. Р. Линейные статистические методы и их применение. — Москва: Наука, 1968.— 548 с.
3. Кендалл М. Дж., Стьюарт А. Теория распределений. — Москва: Наука, 1966.— 588 с.
4. Суслов В. И., Ибрагимов Н. М., Талышева Л. П., Цыплаков А. А. Эконометрия. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2005. — 742 с.
5. Лукашин Ю. Л. Адаптивные методы краткосрочного прогнозирования временных рядов. — Москва: Финансы и статистика, 2003. — 416 с.
6. Савкіна М. Ю. Коваріаційна матриця оцінки параметрів моделі сплайнової регресії з обмеженнями на параметри в вигляді рівностей // Вісник Київського університету. — 2012. — Вип. 4. — С. 191–194.

Інститут матаматики НАН України, вул. Терещенківська, 3, Київ, 01601, Україна.

Надійшла 30.08.14

Журнал обчислювальної та прикладної математики **2015, №1(118)** Journal of Computational & Applied Mathematics

UDC 519.6, 534.1

MODELING OF THE INFLUENCE OF DELAY FACTORS ON THE DYNAMICS OF NON-IDEAL PENDULUM SYSTEMS

A. M. Makaseyev, A. Yu. Shvets

Abstract. The influence of various factors of delay on the dynamics of non-ideal dynamical systems "pendulum-electric motor" is considered. The approaches that allow to reduce the mathematical model of the system to the systems of differential equations without delay are proposed. The maps of dynamical regimes, the dependencies of maximal non-zero Lyapunov's characteristic exponent and phase-parametric characteristics of these systems are studied. The scenarios of transition from steady-state regular regimes to chaotic ones are identified.

Introduction

Mathematical models of pendulum systems are widely used to describe the dynamics of various oscillatory systems. Such models are used to study the oscillation of free liquid surface, membranes, various technical constructions, machines and mechanisms, in the study of cardiovascular system of live organisms, financial markets, etc.

Modern development of energy efficient and energy-preserving technologies requires the highest minimization of excitation source power of oscillatory systems. This leads to the fact that the energy of excitation source is comparable to the energy consumed by the oscillating system. Such systems as "source of excitation — oscillating subsystem" are called non-ideal by Zommerfeld-Kononenko [1]. In mathematical modeling of such systems, the limitation of excitation source power must be always taken into account.

Another important factor that significantly affects the change of steady-state regimes of dynamical systems, is the presence of different in their physical substance, factors of delay. The delay factors are always present in rather extended systems due to the limitations of signal transmission speed: stretching, waves of compression, bending, current strength, etc. In some cases, taking into account factors of delay leads only to minor quantitative changes in dynamic characteristics of pendulum systems. In other cases, taking into account these factors allow to identify qualitative changes in dynamic characteristics [2, 3].

The study of the influence of delay factors on the dynamical stability of equilibrium positions of pendulum systems was initiated by Yu. A. Mitropolsky in [4, 5]. But only ideal pendulum models were initially considered. In this paper non-ideal pendulum systems of the type "pendulum-electric motor" are considered. Mathematical models of such systems, in cases of absent delay factors,

were obtained in [6]. In such systems the existence of chaotic attractors was discovered and proved that the main cause of chaos is limited excitation [6, 7].

Many aspects of constructing solutions of differential equations with delay and stability investigations of such equations are described in [8, 9, 10, 11, 12].

Mathematical model of the system

In [6] the equations of motion of the system "pendulum-electric motor" in the absence of any delay factors were obtained. They are

$$(1)\qquad \begin{cases} \dfrac{dy_1}{d\tau} = Cy_1 - y_2y_3 - \dfrac{1}{8}(y_1^2y_2 + y_2^3); \\ \dfrac{dy_2}{d\tau} = Cy_2 + y_1y_3 + \dfrac{1}{8}(y_1^3 + y_1y_2^2) + 1; \\ \dfrac{dy_3}{d\tau} = Dy_2 + Ey_3 + F; \end{cases}$$

where phase variables y_1y_2 describe the deviation of the pendulum from the vertical and phase variable y_3 is proportional to the rotation speed of the motor shaft. The system parameters are defined by

$$(2)\qquad C = -\delta_1\varepsilon^{-2/3}\omega_0^{-1}, D = -\frac{2ml^2}{I}, F = 2\varepsilon^{-2/3}(\frac{N_0}{\omega_0} + E)$$

where m — the pendulum mass, l — the reduced pendulum length, ω_0 — natural frequency of the pendulum, a — the length of the electric motor crank, $\varepsilon = \frac{a}{l}$, δ_1 — damping coefficient of the medium resistance force, I — the electric motor moment of inertia, E, N_0 — constants of the electric motor static characteristics.

Let us consider the following system of equations:

$$(3)\qquad \begin{cases} \dfrac{dy_1(\tau)}{d\tau} = Cy_1(\tau-\delta) - y_2(\tau)y_3(\tau-\gamma) - \dfrac{1}{8}(y_1^2(\tau)y_2(\tau) + y_2^3(\tau)); \\ \dfrac{dy_2(\tau)}{d\tau} = Cy_2(\tau-\delta) + y_1(\tau)y_3(\tau-\gamma) + \dfrac{1}{8}(y_1^3(\tau) + y_1(\tau)y_2^2(\tau)) + 1; \\ \dfrac{dy_3(\tau)}{d\tau} = Dy_2(\tau-\gamma) + Ey_3(\tau) + F. \end{cases}$$

This system is a system of equations with constant delay. Positive constant parameter γ was introduced to account the delay effects of electric motor impulse on the pendulum. We assume that the delay of the electric motor response to the impact of the pendulum inertia force is also equal to γ. Taking into account the delay γ conditioned by the fact that the wave velocity perturbations on the elements of the construction has a finite value that depends on the properties of external fields, for instance, the temperature field. In turn, the constant positive parameter δ characterizes the delay of the medium reaction on the dynamical state of the pendulum. This delay is due to the limited sound velocity in that medium.

Let us consider two approaches that allow to reduce the time-delay system (3) to the systems of equations without delay. The first approach is as follows. Assuming a small delay, we can write

$$y_i(\tau-\gamma)=y_i(\tau)-\frac{y_1(\tau)}{d\tau}\gamma+...,\quad i=2,3$$

$$y_i(\tau-\delta)=y_i(\tau)-\frac{y_1(\tau)}{d\tau}\delta+...,\quad i=1,2$$

Then, if $C\delta\neq -1$, we get the following system of equations:

(4)
$$\begin{cases} \dot{y_1}=\dfrac{1}{1+C\delta}\left(Cy_1-y_2\left[y_3-\gamma\left(Dy_2+Ey_3+F\right)\right]-\dfrac{1}{8}(y_1^2y_2+y_2^3)\right);\\ \dot{y_2}=\dfrac{1}{1+C\delta}\left(Cy_2+y_1y_3-y_1\gamma(Dy_2+Ey_3+F)+\dfrac{1}{8}(y_1^3+y_1y_2^2)+1\right);\\ \dot{y_3}=(1-C\gamma)Dy_2-\dfrac{D\gamma}{8}(y_1^3+y_1y_2^2+8y_1y_3+8)+Ey_3+F. \end{cases}$$

The obtained system of equations is already a system of ordinary differential equations. Delays are included in this system as additional parameters.

In order to approximate the system (3) another, more precise, method can be used [8]. If $\gamma>0,\ \delta>0$ let us divide the segments $[-\gamma;\ 0]$ and $[-\delta;\ 0]$ into m equal parts. We introduce the following notation

$$y_1(\tau-\tfrac{i\delta}{m})=y_{1i}(\tau),\ y_2(\tau-\tfrac{i\gamma}{m})=y_{2i}(\tau),\ y_2(\tau-\tfrac{i\delta}{m})=\tilde{y}_{2i}(\tau),$$

$$y_3(\tau-\tfrac{i\gamma}{m})=y_{3i}(\tau), i=\overline{0,m}.$$

Then, using difference approximation of derivative [8], [13] we obtain

(5)
$$\begin{cases} \dfrac{dy_{10}(\tau)}{d\tau}=Cy_{1m}(\tau)-y_{20}(\tau)y_{3m}(\tau)-\dfrac{1}{8}(y_{10}^2(\tau)y_{20}(\tau)+y_{20}^3(\tau));\\ \dfrac{dy_{20}(\tau)}{d\tau}=C\tilde{y}_{2m}(\tau)+y_{10}(\tau)y_{3m}(\tau)+\dfrac{1}{8}(y_{10}^3(\tau)+y_{10}(\tau)y_{20}^2(\tau))+1;\\ \dfrac{dy_{30}(\tau)}{d\tau}=Dy_{2m}(\tau)+Ey_{30}(\tau)+F;\\ \dfrac{dy_{1i}(\tau)}{d\tau}=\dfrac{m}{\delta}(y_{1\ i-1}(\tau)-y_{1i}(\tau)),\quad i=\overline{1,m};\\ \dfrac{dy_{2i}(\tau)}{d\tau}=\dfrac{m}{\gamma}(y_{2\ i-1}(\tau)-y_{2i}(\tau)),\quad i=\overline{1,m};\\ \dfrac{d\tilde{y}_{2i}(\tau)}{d\tau}=\dfrac{m}{\delta}(\tilde{y}_{2\ i-1}(\tau)-\tilde{y}_{2i}(\tau)),\quad i=\overline{1,m};\\ \dfrac{dy_{3i}(\tau)}{d\tau}=\dfrac{m}{\gamma}(y_{3\ i-1}(\tau)-y_{3i}(\tau)),\quad i=\overline{1,m}. \end{cases}$$

It is a system of ordinary differential equations of $(4m+3)$-th order. In the absence of one of the delays (γ or δ), using the same reasoning, the system (3) can be reduced to the systems of $(2m+3)$-th order. As in the system (4), the delays are included in these systems as additional parameters. Choosing a

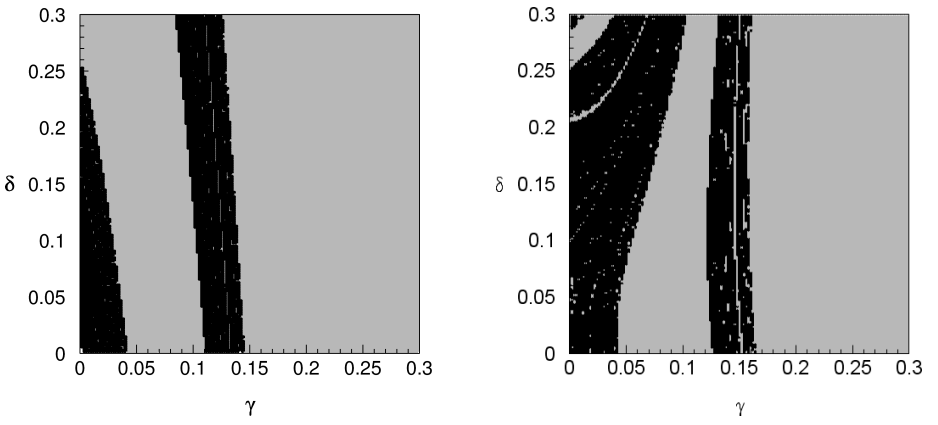


Рис. 1. Maps of dynamical regimes

sufficiently large m in the system (5), the system (3) will be very well approximated by the system (5) [8]. We note that the solutions y_1, y_2, y_3 of the system (3) are described by the functions y_{10}, y_{20}, y_{30} of the system (5).

Therefore, we obtained three-dimensional (4) and fifteen-dimensional (5) models each describing the system of equations with delay (3). These models are the systems of non-linear differential equations, so in general the study of steady-state regimes can be carried out only by using numerical methods and algorithms. The methodology of such studies is described in detail in [6].

Maps of dynamical regimes

A very clear picture of the dynamical system behavior can give us a map of dynamical regimes. It is a diagram on the plane, where two parameters are plotted on axes and the boundaries of different dynamical regimes areas are shown. The construction of dynamical regimes maps is based on analysis and processing of spectrum of Lyapunov characteristic exponents [6, 14]. Where necessary, for more accurate determination of steady-state regime of the system, we study other characteristics of attractors: Poincare sections and maps, Fourier spectrums, phase portraits and distributions of the invariant measure.

Let us consider the behavior of the systems (4) and (5) when the parameters are $C = -0.1$, $D = -0.53$, $E = -0.6$, $F = 0.19$. In fig. 1 the maps of dynamical regimes are shown. The map in fig. 1a was built for three-dimensional model (4) and the map in fig. 1b was built for fifteen-dimensional model (5). These figures illustrate the effect of delays γ and δ on changing the type of steady-state regime of the systems. The dark-grey areas of the maps correspond to equilibrium positions of the system. The light-grey areas of the maps correspond to limit cycles of the system. And finally, the black areas of the maps correspond to chaotic attractors.

We can notice a certain similarity the maps in fig.1a, b. At small values of the delays both systems have chaotic attractors (black areas in the figures). With

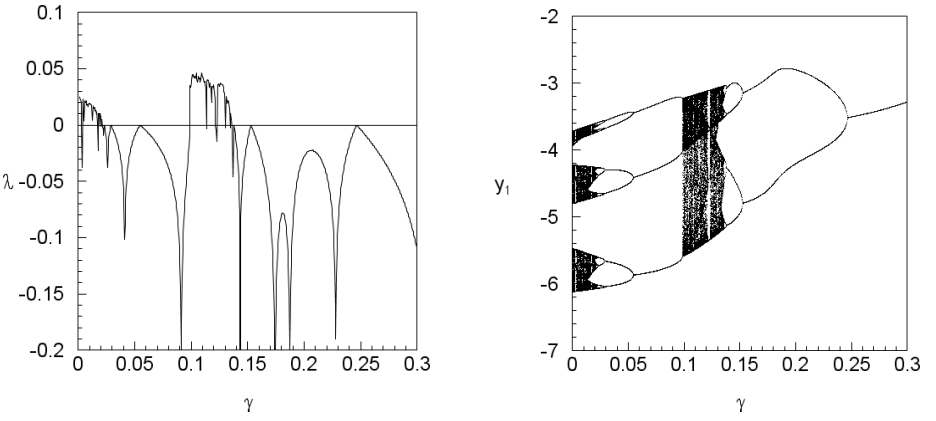


Рис. 2. The dependence of maximal non-zero Lyapunov's characteristic exponent (a), phase-parametric characteristic (b) of three-dimensional system (4)

an increase of the delay values the region of chaos is replaced by the region of periodic regimes (light-grey areas in the figures). Then again chaos arises in the system. Further this area is replaced by the area of limit cycles.

As seen from the constructed maps of dynamical regimes, the dynamics of the system (4) and (5) is the same only at small values of the delay γ and δ. Increasing the delays the differences of the dynamics of these systems are very significant.

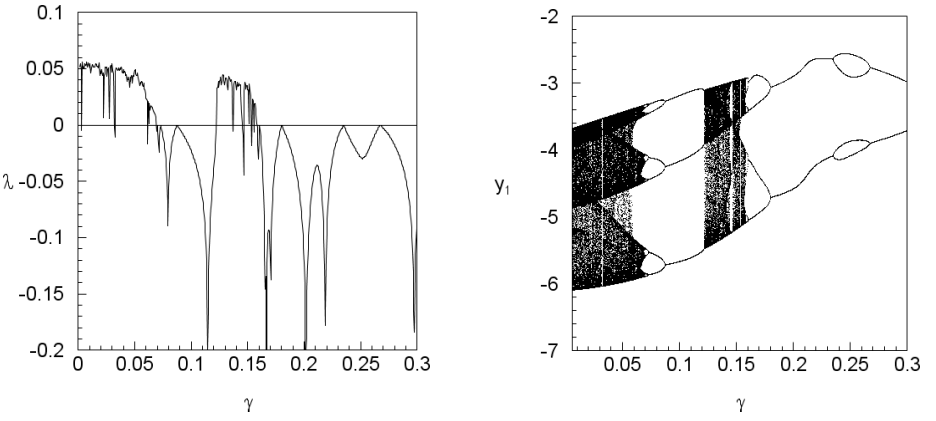
Regular and chaotic dynamics

Let us study the types of regular and chaotic attractors that exist in the systems (4) and (5). We implement a horizontal section of the maps of dynamical regimes in fig.1a, b along the delay γ at $\delta = 0.15$. In other words, let us consider the behavior of the systems (4) and (5) when parameters are $C = -0.1$, $D = -0.53$, $E = -0.6$, $F = 0.19$ and the delays $\delta = 0.15$ and $0 \leq \gamma \leq 0.3$.

In fig. 2a,b the dependence of maximum non-zero Lyapunov's characteristic exponent and phase-parametric characteristic of three-dimensional system (4) are shown respectively. These figures illustrate the influence of the delay of interaction between pendulum and electric motor γ on chaotization of the system (4).

Let us construct the same characteristics at the same values of the parameters for fifteen-dimensional system (5). In fig. 3a,b respectively the dependence of maximum non-zero Lyapunov's characteristic exponent and phase-parametric characteristic are shown.

In fig.2a, 3a we can clearly see the presence of intervals γ in which maximum Lyapunov exponent of the systems is positive. In these intervals the systems have chaotic attractors. The area of existence of chaos is clearly seen in phase-parametric characteristics of the systems. The areas of chaos in the bifurcation trees are densely filled with points. A careful examination of the obtained



a b

Рис. 3. The dependence of maximal non-zero Lyapunov's characteristic exponent (a), phase-parametric characteristic (b) of fifteen-dimensional system (5)

images allows not only to identify the origin of chaos in the systems, but also to describe the scenario of transition to chaos. So with a decrease of γ there are the transitions to chaos by Feigenbaum scenario (infinite cascade of period-doubling bifurcations of a limit cycle). Bifurcation points for the delay γ are clearly visible in each figures. These points are the points of approaches of the Lyapunov's exponent graph to the zero line (fig.2a, 3a) and the points of splitting the branches of the bifurcation tree (fig.2b, 3b). In turn, the transition to chaos with an increase of the delay happens under the scenario of Pomeau-Manneville, in a single bifurcation, through intermittency.

A careful analysis of these figures allows to see qualitative similarity of the respective characteristics of the systems (4) and (5). However, with increasing the delay the differences in the dynamics of these systems become very significant. So for instance at $\gamma = 0.05$ the steady–state regime of the system (4) is limit cycle. While at this value of the delay the attractor of the system (5) is chaotic attractor. Conversely, for example at $\gamma = 0.11$ the system (4) has steady–state chaotic regime. While at this value of the delay the system (5) has periodic regime of oscillations.

This suggests that three-dimensional system of equations (4) should be used to study the system (3) only at very small values of the delay. With increasing values of the delay to study regular and chaotic oscillations of "pendulum-electric motor" system, fifteen-dimensional system of equations (5) should be used.

Conclusion

Taking into account various factors of delay in "pendulum-electric motor" systems is crucial. The presence of delay in such systems can affect the qualitative change in the dynamic characteristics. It is shown, that in some cases the delay is the main reason of origination as well as vanishing of chaotic attractors.

It is shown that for small values of the delay it is sufficient to use three-dimensional mathematical models, whereas for relatively high values of the delay the fifteen-dimensional mathematical model should be used.

References

1. Kononenko V. O. Vibrating System with a Limited Power-supply — London: Iliffe, 1969.
2. Shvets A. Yu., Makaseyev A. M. The influence of delay factors on regular and chaotic oscillations of plane pendulum // Proceedings of Institute of Mathematics of National Academy of Sciences of Ukraine. — 2012. — V. 9, №1. — P. 365–377.
3. Shvets A. Yu., Makaseyev A. M. Delay Factors and Chaotization of Non-ideal Pendulum Systems // Chaotic Modeling and Simulation (CMSIM) Journal. — 2012. — №4. — P. 633–642.
4. Mitropolsky Yu. A., Shvets A. Yu. About influence of delay on a stability of a pendulum with the vibrating suspension point // Analytical methods of non-linear oscillations. — Kyiv. — 1980. — P. 115–120.
5. Mitropolsky Yu. A., Shvets A. Yu. About oscillations of a pendulum with a vibrating point of a suspension at presence delays — Analytical methods of non-linear oscillations. — Kyiv. — 1980. — P. 120–128.
6. Krasnopolskaya T. S., Shvets A. Yu. Regular and chaotical dynamics of systems with limited excitation — Moscow: R&C Dynamics, 2008.
7. Shvets A. Yu., Makaseyev A. M. Chaotic Oscillations of Nonideal Plane Pendulum Systems // Chaotic Modeling and Simulation (CMSIM) Journal. — 2012. — №1. — P. 195–204.
8. Magnizkiy N. A., Sidorov S. V. New methods of chaotic dynamics — Editorial URSS, 2004.
9. Shampine L. F., Gladwell I., Thompson S. Solving ODEs with MATLAB — Cambridge University Press, 2003.
10. Khusainov D. Ya., Shatyrko O. A. Conditions of absolute stability of difference systems with delay // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Cybernetics. — 2010. — №10. — P. 34–47.
11. Khusainov D. Ya., Shatyrko O. A. Stability of nonlinear systems with aftereffect regulation. Textbook. — SE "Information and Analytical Agency", 2012.
12. Azizbekov E. I., Khusainov D. Ya. An iterative method of finding solutions of the second order equation with delay // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics. — 2014. — №2. — P. 93–99.
13. Samarskiy A. A., Gulin A. V. Numerical methods — Moscow: Nauka, 1989.
14. Kouznetsov S. P. Dynamic chaos — Moscow: Physmatlit, 2001.

Department of Mathematical Physics, National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute", 37, Prospect Peremohy, 03056, Kyiv, Ukraine

Received 17.01.2015

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Журнал обчислювальної та прикладної

2015 **МАТЕМАТИКИ** 1(118)

Заснований в 1965 році

ЗМІСТ

Серія "Оптимізація"

И. А. Бойцова
Асимптотически оптимальное управление в дискретных задачах с быстрыми и медленными переменными 3

Я. И. Ведель, В. В. Семенов
Новый двухэтапный проксимальный алгоритм для решения задачи о равновесии 15

А. І. Павленко
Розв'язання залежних від часу задач пошуку найкоротого шляху ... 24

І. П. Сіренко, Л. І. Потапенко, М. В. Пасічна, Н. І. Ляшко
Дослідження задачі максимізації доходу на основі математичної моделі росту культури мікроорганізмів 38

О. А. Харченко, В. І. Царук, Л. М. Чабак
Децентралізований алгоритм для монотонних варіаційних нерівностей 45

Серія "Прикладна математика"

В. О. Рудик
Фрагментальний підхід до розв'язання задачі прогнозування третинної структури молекули протеїну 57

М. Ю. Савкіна
Коваріаційна матриця оцінки параметрів лінійної регресійної моделі з обмеженнями на параметри 63

A. M. Makaseyev, A. Yu. Shvets
Modeling of the influence of delay factors on the dynamics of non-ideal pendulum systems 71