МЕТОД СУММЫ КВАДРАТОВ (SOS): РЕШЕНИЕ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ В ОПТИМИЗАЦИИ И УПРАВЛЕНИИ*

А. Н. Чурилов

a_churilov@mail.ru

29 сентября 2022 г.

1°. Метод SOS. Задачи полиномиальной оптимизации с помощью сумм квадратов (Sums of Squares, SOS) — один из классов задач полуопределенного программирования (Semi-Definite Programming, SDP).

Для наглядности, здесь будут рассмотрены только скалярные полиномы. Аналогичная теория существует для полиномиальных матриц. Некоторые математические подробности можно найти в [1].

Неотрицательные многочлены и SOS-многочлены. Пусть $p(\bar{x})$ — многочлен степени m от n переменных ($\bar{x} \in \mathbb{R}^n$). Многочлен $p(\bar{x})$ называется *неотрицательным*, если $p(\bar{x}) \geqslant 0$ при всех $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$.

Пример. Неотрицательно определенная квадратичная форма, $n = m = 2$,

$$p_0(x_1, x_2) = x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 \geqslant 0, \quad \forall x_1\ \forall x_2.$$

Многочлен $p(\bar{x})$ называется *SOS-многочленом* (Sum Of Squares polynomial), если существуют число k и многочлены $q_1(\bar{x}), \ldots, q_k(\bar{x})$ такие, что

$$p(\bar{x}) = \sum_{i=1}^{k} [q_k(\bar{x})]^2 \quad \forall \bar{x} \in \mathbb{R}^n.$$

Очевидно любой SOS-многочлен неотрицателен.

*Семинар по оптимизации, машинному обучению и искусственному интеллекту «O&ML» `http://oml.cmlaboratory.com/`

Неоднозначность SOS-представления. Обычно положительный многочлен можно представить в виде суммы квадратов (причем SOS-представление неоднозначно).

Пример. Многочлен 4-го порядка

$$p_1(x_1, x_2) = x_1^4 - x_1^2x_2^2 + x_2^4 = \left(x_1^2 - \tfrac{1}{2}\,x_2^2\right)^2 + \left(\tfrac{\sqrt{3}}{2}\,x_2^2\right)^2.$$

По-другому:

$$p_1(x_1, x_2) = (x_1^2 - x_2^2)^2 + (x_1x_2)^2.$$

Отсутствие необходимости SOS-представления. Является ли любой неотрицательный многочлен SOS-многочленом? В общем случае это не так.

Примеры. Многочлены

$$p_2(x_1, x_2) = x_1^2x_2^2(x_1^2 + x_2^2 - 3) + 1,$$
$$p_3(x_1, x_2, x_3) = x_3^6 + x_1^4x_2^2 + x_1^2x_2^4 - 3x_1^2x_2^2x_3^2$$

неотрицательны, но не SOS.

Давид Гильберт доказал, что это выполнено в случаях
(n — число переменных, m — степень).

- Многочлены одной переменной: $n = 1$, m — любое четное;
- многочлены второй степени: n — любое, $m = 2$;
- две переменные, четвертая степень: $n = 2$, $m = 4$.

Задачи SOS. Пусть $P(\bar{x})$ — полином (скалярный или с матричными симметричными коэффициентами).

- Проверка положительности. Определить, выполнено ли

  $$P(\bar{x}) \geqslant 0 \quad \forall \bar{x}.$$

  Заменяется на задачу: имеет ли заданный $P(\bar{x})$ SOS-передставление?

  Наличие SOS-представления — достаточное (но не необходимое) условие положительности $p(\bar{x})$. Тем не менее, для проверки положительности $p(\bar{x})$ часто используют задачу SOS.

- Задача отимизации. Линейная целевая функция

  $$c_1u_1 + \ldots + c_nu_n \to \min\,(\max)$$

  при условии, что u_i — скалярные неизвестные, а полином

  $$p(\bar{x}) = p_0 + p_1(\bar{x})u_1 + \ldots + p_n(\bar{x})u_n$$

  имеет SOS-представление.

17-я проблема Гильберта. Формулировка проблемы: Пусть $p(\bar{x})$ — рациональная функция от n переменных с вещественными коэффициентами такая, что $p(\bar{x}) \geqslant 0$ при всех $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Можно ли ее представить в виде суммы квадратов рациональных функций с вещественными коэффициентами?

Ответ на этот вопрос положительный (Эмиль Артин, 1927). В частности, любой SOS-многочлен можно представить в виде суммы квадратов рациональных функций.

К сожалению, не существует эффективных алгоритмов для SOS-представления рациональных функций. Для полиномов такие алгоритмы есть и они сводятся к задачам SDP.

2°. Идея численного метода: SOS-многочлены и мономы (на примере). Рассмотрим однородный многочлен (форму) степени $2m = 4$:

$$p_1(x_1, x_2) = x_1^4 - x_1^2 x_2^2 + x_2^4$$

В SOS-представлении (если оно есть) должны участвовать одночлены (мономы) не выше 4-й степени —
0-й степени: 1,
1-й степени: x_1, x_2,
2-й степени: x_1^2, x_1x_2, x_2^2,
3-й степени: x_1^3, $x_1^2x_2$, $x_1x_2^2$, x_2^3,
4-й степени: x_1^4, $x_1^3x_2$, $x_1^2x_2^2$, $x_1x_2^3$, x_2^4.

Ограничимся мономами степени $m = 2$ и составим из них вектор:

$$Y = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{bmatrix}.$$

Имеем:

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} M Y, \quad Y = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Здесь M — матрица индефинитной квадратичной формы. В силу структуры вектора Y справедливы равенства $Y_2^2 = Y_1Y_3$ и

$$Y^{\mathsf{T}} L Y = 0, \quad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Получаем:

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} M Y = Y^{\mathsf{T}}(M + \alpha L)Y \quad \forall\, \alpha \in \mathbb{R}.$$

Так как

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} M Y, \quad Y^{\mathsf{T}} L Y = 0,$$

то

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} (M + \alpha L) Y \quad \forall\, \alpha \in \mathbb{R}.$$

Условие SOS-приводимости: существует число α (любого знака) такое, что $M + \alpha L \geqslant 0$.

Получаем линейное матричное неравенство (LMI) относительно неизвестной переменной α. Неравенство выполнено (по критерию Сильвестра) при $\alpha \geqslant 1$.

Мы получили:

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} (M + \alpha L) Y,$$

где $M + \alpha L \geqslant 0$ при $\alpha \geqslant 1$. Тогда существует $k \times 3$-матрица C ($k \leqslant 3$) такая, что

$$M + \alpha L = C^{\mathsf{T}} C \geqslant 0.$$

Пусть

$$C = \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_k \end{bmatrix},$$

где C_j — матрица-строка. Имеем

$$p_1(x_1, x_2) = Y^{\mathsf{T}} C^{\mathsf{T}} C Y = \sum_{j=1}^{k} (C_j Y)^2,$$

т. е. $p_1(x_1, x_2)$ допускает SOS-представление.

В общем случае параметров может быть несколько, и можно применить стандартные программы-солверы для решения LMI.

Пример: рассмотрим вектор мономов

$$Y^{\mathsf{T}} = [x_1^2 \quad x_1 x_2 \quad x_1 x_3 \quad x_2^2 \quad x_2 x_3 \quad x_3^2]$$

Для компонент Y получаем шесть соотношений типа равенство

$$Y^{\mathsf{T}} L_j Y = 0, \quad j = 1, \ldots, 6.$$

и шесть неизвестных переменных

$$\alpha_1, \; \ldots, \; \alpha_6.$$

Получаем линейное неравенство вида

$$M + \alpha_1 L_1 + \ldots + \alpha_6 L_6 \geqslant 0.$$

SOS-представление матричного полинома. Пусть $P(\bar{x})$ — полином, все значения которого — симметричные $m \times m$-матрицы.

Ищется представление вида

$$P(\bar{x}) = (I_m \otimes Y)^\mathsf{T}(\bar{x})Q(I_m \otimes Y(\bar{x})),$$

где $Q^\mathsf{T} = Q \geqslant 0$, $Y(\bar{x})$ — вектор из мономов, $\otimes$ — произведение Кронекера. Например, при $m = 2$:

$$P(\bar{x}) = \begin{bmatrix} Y^\mathsf{T} & 0 \\ 0 & Y^\mathsf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{12} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix}$$

3°. Программное обеспечение. Существуют несколько программных пакетов.

- Пакет `SOSTOOLS` [2]. Отдельный пакет (toolbox) со своим интерфейсом. Требует MATLAB Symbolic Math Toolbox и один из SDP солверов: SeDuMi, SDPT3, CSDP, SDPA, SDPNAL. Коллектив разработчиков — из университетов США и Оксфорда. Первая версия пакета `SOSTOOLS` разработана в 2002, последняя — в сентябре 2021 (версия 4.0). Бесплатный дистрибутив на сайте Калифорнийского технологического института (Caltech).

- Модуль SOS в составе пакета YALMIP [3], работает с MATLAB.

- Несколько библиотек на языке Julia.

4°. Пример задачи SOS. Функция Ляпунова для системы с полиномиальной правой частью. Рассмотрим систему дифференциальных уравнений n-го порядка:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = Q(\bar{x}),$$

где $\bar{x}$ — n-вектор, элементы вектор-функции в правой части $Q_k(\bar{x})$, $k = 1, \ldots, n,$ — полиномы. Будем искать полиномиальную функцию Ляпунова $V = V(\bar{x})$. Тогда ее частные производные

$$\frac{\partial V}{\partial x_k} = \frac{\partial V}{\partial x_k}(\bar{x}), \quad k = 1, 2, 3,$$

тоже полиномы. На решениях системы ее производная

$$\frac{dV}{dt} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial V}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial V}{\partial x_k}(\bar{x})Q_k(\bar{x}).$$

Рассмотрим полином:

$$DV(\bar{x}) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial V}{\partial x_k}(\bar{x}) Q_k(\bar{x}).$$

Пусть ε — некоторое малое число. Для функции Ляпунова получаем неравенства:

$$V(\bar{x}) \geqslant \varepsilon N(\bar{x}), \quad DV(\bar{x}) \leqslant -\varepsilon N(\bar{x}) \quad \forall \bar{x} \in \mathbb{R}^n,$$

где $N(\bar{x}) = x_1^2 + \ldots + x_n^2$. Так как система однородна относительно V, то можно взять новую функцию $W(\bar{x}) = \frac{1}{\varepsilon} V(\bar{x})$, т. е. положить $\varepsilon = 1$.

Получаем два полиномиальных условия:
$V(\bar{x}) - \varepsilon N(\bar{x})$ является SOS,
$-DV(\bar{x}) - \varepsilon N(\bar{x})$ является SOS.

Пример. Функция Ляпунова с помощью SOSTOOLS. Построим функцию Ляпунова для системы:

$$\dot{x}_1 = -x_1^3 + x_2, \quad \dot{x}_2 = -x_1 - x_2.$$

Программный код:

```
syms x1 x2;
f = [-x1^3+x2; -x1-x2];
V = findlyap(f,[x1; x2],2)
```

Получаем:

```
V = 1.195*x1^2 + 5.801e-5*x1*x2 + 1.195*x2^2
```

Пример: функция Ляпунова для системы с рациональной правой частью. Рассмотрим систему уравнений [2]

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -x_1^3 - x_1 x_3^2, \\ \dot{x}_2 &= -x_2 - x_1^2 x_2 \\ \dot{x}_3 &= -x_3 - \tfrac{3x_3}{x_3^2+1} + 3x_1^2 x_3. \end{aligned}$$

Будем искать полиномиальную функцию Ляпунова $V = V(x_1, x_2, x_3)$:

$$V \geqslant \varepsilon \left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right), \quad \varepsilon > 0;$$

$$\dot{V} = \frac{\partial V}{\partial x_1}\dot{x}_1 + \frac{\partial V}{\partial x_2}\dot{x}_2 + \frac{\partial V}{\partial x_3}\dot{x}_3 \leqslant 0.$$

Заменим $V \mapsto V/\varepsilon$ и умножим на $x_3^2 + 1$:

$$V \geqslant x_1^2 + x_2^2 + x_3^2;$$

$$-(x_3^2+1)\frac{\partial V}{\partial x_1}\dot{x}_1 - (x_3^2+1)\frac{\partial V}{\partial x_2}\dot{x}_2 - (x_3^2+1)\frac{\partial V}{\partial x_3}\dot{x}_3 \geqslant 0.$$

Пример. Функция Ляпунова с помощью SOSTOOLS.

```
syms x1 x2 x3;
X = [x1; x2; x3];
f = [-x1^3-x1*x3^2;  -x2-x1^2*x2;
    -x3+3*x1^2*x3-3*x3/(x3^2+1)];
f = f * (x3^2+1);
Y = [x1^2; x2^2; x3^2];
eps = 1e-6;
prog = sosprogram(X);
[prog,V] = sospolyvar(prog,Y); % полиномиальная переменная
prog = sosineq(prog,V-eps*(x1^2+x2^2+x3^2));
expr = -diff(V,x1)*f(1)-diff(V,x2)*f(2)-diff(V,x3)*f(3);
prog = sosineq(prog,expr);
prog = sossolve(prog);
solV = sosgetsol(prog,V)
```

Получаем:

```
solV = 0.6309*x1^2 + 0.5163*x2^2 + 0.2054*x3^2
```

5°. Пример задачи SOS. Круговой критерий абсолютной устойчивости. Пусть $W(s)$ — дробно-рациональная функция, μ_1, μ_2 — скаляры, $\mu_1 < \mu_2$. Частотное неравенство кругового критерия [4]:

$$1 + (\mu_1 + \mu_2)\operatorname{Re} W(i\omega) + \mu_1\mu_2|W(i\omega)|^2 \geqslant 0 \quad \forall\omega \in \mathbb{R}.$$

Так как комплексное сопряжение дает

$$\overline{W(i\omega)} = W(-i\omega),$$

то

$$\operatorname{Re} W(i\omega) = \frac{1}{2}\left(W(i\omega) + W(-i\omega)\right), \quad |W(i\omega)|^2 = W(-i\omega)W(i\omega).$$

Пусть $W(s) = M(s)/N(s)$, где $M(s)$, $N(s)$ — многочлены. Тогда

$$\operatorname{Re} W(i\omega) = \frac{1}{2}\left(\frac{M(i\omega)}{N(i\omega)} + \frac{M(-i\omega)}{N(-i\omega)}\right) = \frac{1}{2}\,\frac{M(i\omega)N(-i\omega) + M(-i\omega)N(i\omega)}{N(i\omega)N(-i\omega)},$$

$$|W(i\omega)|^2 = \frac{M(i\omega)M(-i\omega)}{N(-i\omega)N(i\omega)}.$$

Так как $N(-i\omega)N(i\omega) = |N(i\omega)|^2 \geqslant 0$, частотное неравенство принимает вид:

$$N(i\omega)N(-i\omega) + \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)\Big(M(i\omega)N(-i\omega) + M(-i\omega)N(i\omega)\Big) + \\ + \mu_1\mu_2 M(i\omega)M(-i\omega) \geqslant 0, \quad \forall \omega \in \mathbb{R}.$$

Определим многочлены

$$\begin{aligned} P(s) &= N(s)N(-s) + \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2)\Big(M(s)N(-s) + M(-s)N(s)\Big) + \\ &\quad + \mu_1\mu_2 M(s)M(-s), \\ Q(\omega) &= P(i\omega). \end{aligned}$$

Можно показать, что при вещественных коэффициентах $W(s)$ многочлен $Q(\omega)$ также имеет вещественные коэффициенты. Частотное неравенство принимает вид:

$$Q(\omega) \geqslant 0 \quad \forall \omega \in \mathbb{R}.$$

Т.к. $Q(\omega)$ — многочлен одной переменной, его положительность зквивалентна существованию SOS-представления.

Круговой критерий: программа SOSTOOLS.

```
syms s omega
mu2 = 0.5; mu1 = - 0.4;
M = s + 1;
N = s^3 + s^2 + s + 2;
Mm = subs(M,s,-s);   % M(-s)
Nm = subs(N,s,-s);   % N(-s)
P = N*Nm +0.5*(mu1+mu2)*(M*Nm+Mm*N);
P = simplify(P + mu1*mu2*M*Mm)
Q = simplify(subs(P,s,i*omega))
[M,Y]= findsos(Q)
eig(M)
```

Имеем

```
P =  - s^6 - (11*s^4)/10 + (16*s^2)/5 + 4
Q = omega^6 - (11*omega^4)/10 - (16*omega^2)/5 + 4
```

Получаем $Q = Y^{\mathsf{T}} M Y$,

```
M =
    4.0000   -0.0000   -2.7095    0.0000
   -0.0000    2.2190   -0.0000   -1.4868
   -2.7095   -0.0000    1.8736    0.0000
    0.0000   -1.4868    0.0000    1.0000
Y =
       1
   omega
 omega^2
 omega^3
```

Собственные значения матрицы M:

```
5.8474    0.0262    3.2164     0.0026.
```

Они показывают, что $M > 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Parrilo, P. A. Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems // Mathematical programming. 2003. V. 96, № 2. P. 293–320.

2. `SOSTOOLS` User's Guide. Sum of Squares Optimization Toolbox for MATLAB. Version 4.0. 14th September 2021. `https://www.cds.caltech.edu/sostools/`

3. YALMIP Tutorial. Sum of Squares programming `https://yalmip.github.io/tutorial/sumofsquaresprogramming/`

4. Гелиг А. Х., Леонов Г. А., Якубович В. А. Устойчивость нелинейных систем с неединственным состоянием равновесия. М.: Наука, 1978. 400 с.