

Для ускорения работы РНК-метода используется квадратичная аппроксимация задачи, основанная не только на локальных данных в текущей точке – матрице Гессе, но также на значениях функций в точках предыдущих итераций. Это позволяет более точно и надежно аппроксимировать задачу. Рассматривается несколько вариантов метода.

© В.В. Бойко, В.Н. Кузьменко,
2010

УДК 519.8

В.В. БОЙКО, В.Н. КУЗЬМЕНКО

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАДРАТИЧНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ В РНК-МЕТОДЕ

Введение. Несмотря на наличие многих методов второго порядка их успешное применение зависит от того, насколько начальная точка близка к оптимальной [1, 2].

При этом есть методы, основанные на использовании информации в окрестности текущей точки. Один из таких методов – комбинированный РНК-метод [3]. Опыт применения РНК-метода для решения прикладных задач показал вычислительную эффективность и надежность данного метода [4, 5]. Однако при решении гладких задач или задач, у которых в некоторой окрестности решения задача является гладкой, может наблюдаться медленная сходимость метода.

Поэтому в настоящей работе исследуется возможность использования квадратичной аппроксимации, основанной не только на локальных данных о вторых производных, но также о значениях функций в точках предыдущих итераций. Это позволяет комбинировать локальную информацию об оптимизируемой задаче, имеющуюся в текущей рекордной точке, с информацией в некоторой окрестности этой точки. Тем самым снимается вопрос о значительной зависимости скорости сходимости методов второго порядка от близости к точке оптимума. Далее рассматривается несколько конкретных вариантов построения квадратичных аппроксимаций, основанных на таком подходе, в частности, это использование и коррекция регуляризирующей квадратичной матрицы, коррекция матрицы Гессе и более общая процедура.

В общем виде задача формулируется следующим образом:

$$\min_x \{f(x): f_j(x) \leq 0, 1 \leq j \leq m, x \in M\}, \quad (1)$$

где $x \in R^n$; f, f_j – выпуклые непрерывные функции, принимающие конечные значения на M , где M – выпуклый многогранник.

Положим $\varphi(x) = \max_j \{f_j(x): 1 \leq j \leq m\}$ и переформулируем задачу так: $\min_x \{f(x): \varphi(x) \leq 0, x \in M\}$.

Пусть метод сделал $k-1 < n$ итерацию. В результате получено множество точек X_k , состоящее из начальной точки $x_1 \in M$ и k точек $x_i \in M, i = \overline{2, k}$ – результатов итераций.

Очередная k -я итерация заключается в нахождении точки x_{k+1} путем решения оценочной задачи, в которой ищется минимум штрафной функции, а целевая функция и ограничения заменены на их линейные аппроксимации, построенные по точкам множества X_k , а именно:

$$\min_{x, \xi_1, \xi_2} \left\{ \frac{1}{2h_k} \|x - x_r\|^2 + \xi_1 + N_k \xi_2 \right\}, \quad (2)$$

$$f(x_i) + (f'(x_i), x - x_i) \leq \xi_1, \quad \forall x_i \in X_k, \quad (3)$$

$$\varphi(x_i) + (\varphi'(x_i), x - x_i) \leq \xi_2, \quad \forall x_i \in X_k, \quad (4)$$

$$0 \leq \xi_2, x \in M, \quad (5)$$

где $x_r = \arg \min \{F_k(x): x \in X_k\}$ – точка минимума штрафной функции $F_k(x) = f(x) + N_k \max\{0; \varphi(x)\}$ на X_k ; r – индекс этой точки; $f'(x), \varphi'(x)$ – элементы субдифференциалов $\partial f(x), \partial \varphi(x)$; N_k – значение штрафного множителя на итерации k ; переменная ξ_1 аппроксимирует целевую функцию f с помощью системы неравенств (3); переменная ξ_2 аппроксимирует функцию ограничений φ с помощью системы неравенств (4); квадратичная добавка в (2) служит для регуляризации задачи (2)–(5) и ограничения окрестности поиска с помощью шагового множителя h_k .

Сначала рассмотрим задачу с гладкой целевой функцией. В этом случае построим квадратичную аппроксимацию целевой функции и добавим ее к системе (3) для более точной аппроксимации. Квадратичную аппроксимацию будем искать в виде $q(x) = q_0 + (d, x) + 0.5 * (x, C x)$, так, чтобы выполнялось

$$q(x_i) = q_0 + (d, x_i) + 0.5 * (x_i, C x_i) = f_i, \quad \forall x_i \in X_k, \quad (6)$$

$$\nabla q(x_r) = d + C x_r = g_r, \quad (7)$$

где d – вектор, C – симметричная неотрицательно определенная матрица, $f_i = f(x_i), g_r = f'(x_r)$.

Для нахождения d и C выполним преобразование пространства и переход к базису, который состоит из разностей $p_i = x_i - x_r$ и части векторов исходного базиса.

Общий вид изменения функции и градиента при аффинном преобразовании пространства $y = Tx + w$ задаются соотношениями $f(x) = f(T^{-1}(y - w)) = \psi(y)$, $\nabla_y \psi(y) = T^{-1T} \nabla_x f(x(y))$, где $x(y) = T^{-1}(y - w)$. Предполагается, что преобразование является взаимно-однозначным отображением и обратная матрица T^{-1} существует.

В нашем случае сначала выполним преобразование пространства $p = x - x_r$, в результате которой начало координат перейдет в точку x_r . Для этого преобразования $T = E$ – единичная матрица, $w = -x_r$. Функция $q(x)$ заменится функцией $s(p)$, а именно:

$$\begin{aligned} q(x) &= q(p + x_r) = s(p) = q_0 + (d, p + x_r) + 0.5 * (p + x_r, C(p + x_r)) = \\ &= q_0 + (d, x_r) + (x_r, C x_r) + (d + C x_r)p + 0.5 * (p, C p) = f_r + (g_r, p) + 0.5 * (p, C p). \end{aligned}$$

Так как $d = g_r - C x_r$, то для построения квадратичной аппроксимации достаточно найти матрицу C .

Учтя, что $p_r = 0$, система (6), (7) заменяется такой системой

$$s(p_i) = f_r + (g_r, p_i) + 0.5 * (p_i, C p_i) = f_i, \quad i \in \overline{1, k} \setminus r. \quad (8)$$

Предположим, что вектора $p_i, i \in \overline{1, k-1}$ линейно независимы (тем самым предполагаем, что $k = r$). Дополним их до нового базиса $n - k + 1$ ортами исходного базиса. Пусть матрица T задает преобразование текущего базиса в новый таким образом, что векторам p_i соответствуют первые $k - 1$ ортов e_i нового базиса: $e_i = T p_i$.

Построим матрицу T . Так как $T^{-1} e_i = p_i, i \in \overline{1, k-1}$, то первые $k - 1$ столбцов матрицы T^{-1} совпадают с векторами p_i . Остальные $n - k + 1$ столбцов матрицы T^{-1} совпадают с некоторыми ортами $e_{j(i)}$ исходного базиса, включенными в новый базис, так как $T^{-1} e_i = e_{j(i)}, i \in \overline{k, n}$.

Пусть Π – матрица перестановок, приводящая матрицу T^{-1} путем перестановки строк к виду $\Pi T^{-1} = \begin{pmatrix} P_1 & 0 \\ P_2 & E_2 \end{pmatrix}$. Тогда $T = (T \Pi^{-1}) \Pi =$
 $= (\Pi T^{-1})^{-1} \Pi = \begin{pmatrix} P_1^{-1} & 0 \\ -P_2 P_1^{-1} & E_2 \end{pmatrix} \Pi$. Здесь Π выполняет перестановку столбцов.

В новом базисе квадратичная аппроксимация $\psi(y)$ выразится так:

$$\begin{aligned} q(x) = s(p) = s(T^{-1}y) = \psi(y) &= f_r + (g_r, T^{-1}y) + 0.5(T^{-1}y, CT^{-1}y) = \\ &= f_r + (T^{-1T}g_r, y) + 0.5*(y, T^{-1T}CT^{-1}y). \end{aligned}$$

Обозначим $\hat{d} = T^{-1T}g_r$, $\hat{C} = T^{-1T}CT^{-1}$. Тогда система (8) преобразуется к виду

$$f_r + (\hat{d}, e_i) + 0.5*(e_i, \hat{C}e_i) = f_i, \quad i \in \overline{1, k-1}. \quad (9)$$

Отсюда находятся $k-1$ первые диагональные элементы матрицы \hat{C} : $\hat{c}_{ii} = 2*(f_i - f_r - \hat{d}_i)$, где $\hat{d}_i = (p_i, g_r)$ – i -я компонента вектора \hat{d} , которые точно приближают целевую функцию в точках $x_i \in X_k$. Если $f(x)$ – выпуклая функция, то коэффициенты \hat{c}_{ii} – неотрицательны.

Не уточняя пока значений других элементов матрицы \hat{C} вернемся к матрице C . По матрице \hat{C} искомая матрица C находится следующим образом:

$$C = T^T \hat{C} T = \Pi^T \begin{pmatrix} P_1^{-1T} & (-P_2 P_1^{-1})^T \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \hat{C} \begin{pmatrix} P_1^{-1} & 0 \\ -P_2 P_1^{-1} & E_2 \end{pmatrix} \Pi.$$

При $k \ll n$ вид преобразования матрицы похож на ее разложение по Холескому, которое часто используется алгоритмами квадратичной оптимизации.

Зная матрицу C , добавим к системе (3) квадратичную аппроксимацию целевой функции $f(x)$ исходной задачи в виде ограничения $f_r + (g_r, x - x_r) + 0.5*(x - x_r, C(x - x_r)) \leq \xi_1$ и, включив его с помощью множителя Лагранжа $\lambda \geq 0$ в целевую функцию (2), получаем такую целевую функцию задачи (2)–(5):

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2h_k} \|x - x_r\|^2 + \xi_1 + N_k \xi_2 + \lambda \left(f_r + (g_r, x - x_r) + \frac{1}{2}(x - x_r, C(x - x_r)) - \xi_1 \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(x - x_r, \left(\frac{1}{h_k} E + \lambda C \right) (x - x_r) \right) + \lambda (g_r, x - x_r) + (1 - \lambda)\xi_1 + N_k \xi_2 + \lambda f_r. \quad (10) \end{aligned}$$

Из последнего выражения видно, что оптимальное значение множителя λ не превосходит 1, т. е. лежит в интервале $[0, 1]$. Поскольку квадратичная аппроксимация не является необходимой в задаче (2)–(5), то множитель λ может быть использован как параметр метода. А именно: при $\lambda = 0$ получаем исходный РНК-метод, не использующий квадратичной аппроксимации, а при $\lambda = 1$ переменная ξ_1 и система ограничений (3) становятся несущественными и в методе используется только квадратичная аппроксимация исходной целевой функции $f(x)$, соответствующая системе (3).

Поскольку в соответствии с целью аппроксимации в матрице \hat{C} достаточно определить только $k - 1$ первых диагональных элемента, то существует свобода в определении остальных элементов матрицы, что порождает варианты ее построения. Рассмотрим их.

1. Матрица \hat{C} остается нулевой, кроме $k - 1$ первых найденных диагональных элементов. В этом случае преобразование матрицы \hat{C} в C упрощается. А именно: $C = T^T \hat{C} T = \Pi^T \begin{pmatrix} P_1^{-1T} \hat{C}_1 P_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Pi$, где \hat{C}_1 – подматрица с вышевычисленными ненулевыми диагональными элементами \hat{c}_{ii} .

При фиксированных переменных $x = x_i, i \in \overline{1, k}$ и минимизации по ξ_1, ξ_2 задача (10), (3)–(5) имеет решения $\|x_i - x_r\|^2 / (2h_k) + f_i + N_k \max\{0, \varphi_i\}$, которые больше, чем значения штрафной функции в точках $x = x_i, i \in \overline{1, k} \setminus r$.

2. Построим матрицу \hat{C} таким образом, чтобы решения задачи (10), (3)–(5) в точках $x = x_i, i \in \overline{1, k}$ совпадали со штрафной функцией при фиксированном значении множителя $\lambda > 0$. Положим $E_\lambda = 1/(h_k \cdot \lambda) \cdot E$. Вычислим матрицу $\hat{E}_\lambda = T^{-1T} E_\lambda T^{-1}$, выполнив обратное преобразование матрицы. Построим диагональную матрицу R , для которой первые $k - 1$ элемента определяются как $r_{ii} = \sqrt{\hat{c}_{ii} / \hat{e}_{\lambda ii}}$, где $\hat{e}_{\lambda ii}$ – диагональные элементы матрицы \hat{E}_λ , а остальные полагаются равными 1. Матрица $\hat{C} = R \hat{E}_\lambda R$ будет иметь первые $k - 1$ диагональные элементы равные \hat{c}_{ii} и будет симметричной положительно определенной. В результате матрица C будет вычисляться так $C = T^T R T^{-1T} E_\lambda T^{-1} R T = 1/(h_k \cdot \lambda) \cdot (T^{-1} R T)^T T^{-1} R T = 1/(h_k \cdot \lambda) \cdot \tilde{N}_T$.

Запишем функцию (10) без исходной регуляризирующей добавки $\|x_i - x_r\|^2 / (2h_k)$. Получим

$$\begin{aligned} & \xi_1 + N_k \xi_2 + \lambda \left(f_r + (g_r, x - x_r) + \frac{1}{2} (x - x_r, C(x - x_r)) - \xi_1 \right) = \\ & = \frac{1}{2h_k} (x - x_r, C_T(x - x_r)) + \lambda (g_r, x - x_r) + (1 - \lambda) \xi_1 + N_k \xi_2 + \lambda f_r. \end{aligned} \quad (11)$$

В силу построения матрицы C решение задачи (11), (3)–(5) для фиксированных переменных $x = x_i, i \in \overline{1, k}$ даст $f_i + N_k \max\{0, \varphi_i\}$, что точно равно значению штрафной функции. Зафиксируем теперь вектор x_v такой, что разность $p_v = x_v - x_r$ в базисе $p_i, i \in \overline{1, k-1}, e_{j(i)}, i \in \overline{k, n}$ выражается только через

вектора $e_{j(i)}$, т. е. имеет в начале $k-1$ нулевую компоненту $\begin{pmatrix} 0 \\ V_2 \end{pmatrix}$.

Тогда $T^{-1}RTp_v = T^{-1}R\begin{pmatrix} 0 \\ V_2 \end{pmatrix} = T^{-1}\begin{pmatrix} 0 \\ V_2 \end{pmatrix} = p_v$. Отсюда получаем

$$\frac{1}{2h_k}(x_v - x_r, C_T(x_v - x_r)) = \frac{1}{2h_k}(T^{-1}RTp_v, T^{-1}RTp_v) = \frac{1}{2h_k}\|x_v - x_r\|^2,$$

что совпадает с исходной регуляризующей добавкой.

Заключение. В результате выполненной работы построены варианты PNK-метода, основанные на квадратичной оценке задачи по множеству точек. В сочетании с линейной аппроксимацией задачи это позволяет значительно ускорить работу метода в случае гладких и кусочно-гладких функций.

В.В. Бойко, В.М. Кузьменко

ВИКОРИСТАННЯ КВАДРАТИЧНОГО НАБЛИЖЕННЯ ФУНКЦІЙ У PNK-МЕТОДІ

Для прискорення роботи PNK-метода використовується квадратична апроксимація задачі, яка спирається не тільки на локальні дані в поточній точці (матриця Гессе), але й на значення функцій у точках попередніх ітерацій. Це дозволяє більш точно і надійно апроксимувати задачу. Розглядаються декілька варіантів метода.

V.V. Boyko, V.M. Kuzmenko

USING QUADRATIC APPROXIMATION FOR FUNCTION IN PNK-METHOD

A quadratic approximation for functions is used in PNK-method to increase its productivity. Quadratic approximation uses not only local information in a current point (Hessian matrix) but functions values in previous points. This approach permits make more precise and reliable approximation. Authors consider some variants of approach.

1. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384 с.
2. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. – М.: Мир, 1985. – 509 с.
3. Пшеничный Б.Н., Ненахов Э.И., Кузьменко В.Н. Комбинированный метод решения общей задачи выпуклого программирования // Кибернетика и системный анализ. – 1998. – № 4. – С. 121–134.
4. Кузьменко В.Н., Бойко В.В. О применении комбинированного метода выпуклого программирования // Теорія оптимальних рішень. – К.: Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2003. – С. 19–24.
5. Бойко В.В., Кузьменко В.Н. Применение комбинированного метода выпуклого программирования в задачах финансовой математики // Теорія оптимальних рішень. – К.: Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2008. – С. 146–152.

Получено 06.04.2010