

УДК 519.853.32

Минимизация квадратичной функции на шаре

Е.А. Котельников

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

Котельников Е.А. Минимизация квадратичной функции на шаре // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2014. — Т. 17, № 4. — С. 329–338.

В работе предлагается последовательный алгоритм решения задачи минимизации квадратичной функции на шаре. На каждой итерации схемы решается двухмерная задача минимизации. Приведены численные сравнения с другими методами.

Ключевые слова: квадратичная минимизация на шаре, разложение Холецкого, доверительная область, траектория шага, квадратичная модель.

Kotel'nikov E.A. Minimization of a quadratic function on the sphere // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2014. — Vol. 17, № 4. — P. 329–338.

In this paper, a sequential algorithm for solving the problem of minimization of a quadratic function on a sphere is proposed. At each iteration of the scheme, a two-dimensional problem of minimization is solved. Numerical comparisons with other methods are presented.

Key words: quadratic optimization on sphere, Cholesky decomposition, trust region, step trajectory, quadratic model.

Введение

Рассматривается задача минимизации на шаре $S = \{s \in R^n : \|s\| \leq \delta\}$ выпуклой квадратичной функции $f(s) = \frac{1}{2}s^T Qs + g^T s$:

$$\text{найти } \min_{s \in S} f(s). \quad (1)$$

Здесь и далее норма $\|\cdot\|$ евклидова. Краткий обзор области применения этой задачи и некоторые подходы к ее решению можно найти в [1].

Если s^N — ньютоновская точка, т. е. точка безусловного минимума функции f , то s^N — решение задачи (1) при $\|s^N\| \leq \delta$.

В дальнейшем будем полагать, что $\|s^N\| > \delta$. Тогда, согласно [2], решением задачи (1) является вектор

$$s(\mu) = -(Q + \mu I)^{-1}g \quad (2)$$

при единственном $\mu > 0$ таком, что

$$\|s(\mu)\| = \delta. \quad (3)$$

Для решения задачи (1) в применении к методу доверительной области, основой которого она является, существует ряд методов, которые являются приближенными и не требуют большого числа вычислений. Например, в [2] приведены описания двух методов: метод с ограниченным криволинейным шагом и метод с шагом в виде плоской кусочно-линейной кривой с двумя изломами, а в [3] предлагается алгоритм вычисления шага в виде гладкой плоской кривой.

В [4] показано, что траектория $s(\mu)$ из (2) может быть представлена в виде:

$$s(\mu) = - \sum_{i=1}^m \eta_i(\mu)(Q^{-1})^i g, \quad (4)$$

и на основе этого представления предлагается строить различные ее аппроксимации. Здесь m — размерность минимального инвариантного относительно Q подпространства из R^n , содержащего g , а коэффициенты $\eta_i(\mu)$ определяются следующим образом. Пусть разложение вектора g по базису $\{Q^{-1}g, (Q^{-1})^2g, \dots, (Q^{-1})^m g\}$ подпространства Крылова

$$K^m(g, Q^{-1}) = \text{span}(Q^{-1}g, (Q^{-1})^2g, \dots, (Q^{-1})^m g)$$

имеет вид $g = \sum_{i=1}^m \gamma_i(Q^{-1})^i g$. Используя коэффициенты γ_i , определим многочлены:

$$M_k(\mu) = \mu^k \gamma_{m-k} - \mu^{k-1} \gamma_{m-k+1} + \dots + (-1)^{k-1} \mu \gamma_{m-1} + (-1)^k \gamma_m, \quad k = 0, 1, \dots, m.$$

Тогда коэффициенты $\eta_i(\mu)$ представляются выражениями:

$$\eta_k(\mu) = \mu^{k-1} \frac{M_{m-k}(\mu)}{\mu^m + M_{m-1}(\mu)}, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Очевидно, что вычисление траектории $s(\mu)$ из (4) затруднено по причине высокой трудоемкости нахождения коэффициентов γ_i и невозможности вычисления многочленов $M_k(\mu)$ при больших значениях k . Однако такое представление кривой $s(\mu)$ позволяет строить ее аппроксимации, простые в использовании. В [4] предлагается кусочно-линейная аппроксимация с двумя изгибами для чисел μ_1, μ_2 ($\mu_1 < \mu_2$):

$$s(\mu) = \begin{cases} -Q^{-1}g + \mu(Q^{-1})^2g & \text{при } \mu \leq \mu_1, \\ -\frac{1}{\mu}g & \text{при } \mu \geq \mu_2, \\ s(\mu_1) + \frac{\mu - \mu_1}{\mu_2 - \mu_1}(s(\mu_2) - s(\mu_1)) & \text{при } \mu_1 \leq \mu \leq \mu_2. \end{cases}$$

Значения μ_1, μ_2 выбираются таким образом, чтобы $\|s(\mu)\|$ убывала, а $f(s(\mu))$ возрастала при увеличении μ .

В данной работе предлагается итерационный алгоритм решения задачи (1), на каждой итерации которого решается двухмерная задача.

Представление задачи (1) в виде последовательности двухмерных задач описывается в первом пункте. Во втором пункте приводится алгоритм решения двухмерной задачи, в третьем — иллюстрация работы алгоритма решения задачи (1) и дается сравнительный анализ его работы с работой метода с шагом с двойным изломом из [2], метода, предложенного в [3], и метода с шагом с двойным изломом из [4].

1. Представление исходной задачи в виде последовательности двухмерных задач

Двухмерная задача — это задача минимизации функции f на множестве, которое является пересечением шара S и подпространства $P = \text{span}(s_1, s_2)$, где $s_1, s_2 \in R^n$ линейно независимы, а последовательность двухмерных задач — это набор решаемых друг за другом двухмерных задач, где по результату решения каждой из них определяется пара линейно независимых векторов s_1, s_2 для формирования следующей. Проблему выбора векторов s_1, s_2 для формирования каждой задачи последовательности поможет решить следующая лемма.

Лемма 1. Если $s \in R^n$ не является решением задачи (1), $\|s\| = \delta$ и $f(s) < f(ts)$ для любого $t \in (0, 1)$, то векторы s и $\nabla f(s)$ линейно независимы.

Доказательство. Предположим, что для некоторого $s \in R^n$, удовлетворяющего условиям леммы, существует $\mu > 0$ такое, что $s = -\mu \nabla f(s)$. Тогда в силу того, что s не является решением задачи (1), существует точка $s_1 \in S$, $s_1 \neq s$, удовлетворяющая неравенству $\nabla f(s)^\top (s_1 - s) < 0$ или $s^\top (s_1 - s) > 0$. Последнее неравенство не может быть выполнено для векторов $s, s_1 \in S$, $s \neq s_1$ и $\|s\| = \delta$, а это противоречит нашему предположению.

Допустим, что для некоторых $\mu > 0$ и $\|s\| = \delta$ выполнено равенство $s = \mu \nabla f(s)$. Из этого равенства следует, что s — точка локального максимума функции f на шаре S' , что противоречит условию $f(s) < f(ts)$ для $t \in (0, 1)$.

Таким образом, векторы s и $\nabla f(s)$ не коллинеарны. □

Для формирования первой задачи последовательности двумерных задач необходимо выбирать точку s_0 , удовлетворяющую условиям $\|s_0\| = \delta$ и $f(s_0) < f(ts_0)$ для $t \in (0, 1)$. Для этого подходит, например, $s_0 = \frac{\delta}{\|s^N\|} s^N$, где s^N — ньютоновская точка. Если s_0 не является решением задачи (1), то, согласно лемме, векторы s_0 и $\nabla f(s_0)$ линейно независимы, и можно рассматривать первую задачу минимизации функции f на множестве $S \cap P_0$, где $P_0 = \text{span}(s_0, \nabla f(s_0))$, решение которой s_1 удовлетворяет условию $f(s_1) < f(ts_1)$, $t \in (0, 1)$. Если s_1 не является решением задачи (1), то формируется вторая задача и т. д. В результате на $(k + 1)$ -м шаге (итерации) получим задачу:

$$\text{найти } \min_{s \in S \cap P_k} f(s), \tag{5}$$

решение которой обозначим через s_{k+1} . Здесь $P_k = \text{span}(s_k, g_k)$, $g_k = \nabla f(s_k)$.

Точка s_k является решением задачи (1), если выполнено условие $g_k^\top (s - s_k) \geq 0 \forall s \in S$. Чтобы проверить это условие, достаточно сначала найти вектор $a_k = \arg \min_{s \in S} g_k^\top s$ ($a_k = -\frac{\delta}{\|g_k\|} g_k$), затем проверить выполнение неравенства $g_k^\top (a_k - s_k) \geq -\varepsilon$, где ε — малое положительное число. Если неравенство верно, то точку s_k можно считать решением задачи (1) с заданной точностью ε .

Теорема. При сделанных выше предположениях последовательность $\{s_k\}$ решений задачи (5) сходится к s^* — решению задачи (1) при $k \rightarrow \infty$.

Доказательство. Будем считать, что для любого $k > 0$ точка $s_k = \arg \min_{s \in S \cap P_{k-1}} f(s)$ не является решением задачи (1). Это означает, что множество

$$S_k = \{s \in S : g_k^\top (s - s_k) < 0\}$$

не пусто. Тогда не пусто множество $S_k \cap P_k$, так как, с одной стороны, точка $a_k = -\frac{\delta}{\|g_k\|} g_k$ принадлежит P_k , а с другой — $g_k^\top a_k < g_k^\top s_k$, т. е. $a_k \in S_k$.

Для любой точки $s \in S_k \cap P_k$ имеем $f(s) < f(s_k)$. Пусть $s_{k+1} = \arg \min_{s \in S_k \cap P_k} f(s)$, тогда $f(s_{k+1}) < f(s_k)$. Числовая последовательность $\{f(s_k)\}$ — строго убывающая и ограничена снизу ($f(s_k) \geq \min_{s \in S} f(s)$), поэтому имеет предел f . Покажем, что $\bar{f} = f(s^*)$.

Рассмотрим точку $\bar{s} \in R^n$ такую, что $\|\bar{s}\| = \delta$ и $f(\bar{s}) = \bar{f}$. Пусть $\bar{g} = \nabla f(\bar{s})$, $f^* = f(s^*)$.

Предположим, что $\bar{f} > f^*$. Множество $\bar{S} = \{s \in S : \bar{g}^\top (s - \bar{s}) < 0\}$ не пусто в силу того, что $s^* \in \bar{S}$.

Векторы \bar{s} и \bar{g} линейно независимы, так как в противном случае:

а) если $\bar{g} = \mu\bar{s}$, $\mu > 0$, то \bar{s} — точка локального максимума функции f на шаре S ;

б) если $\bar{g} = \mu\bar{s}$, $\mu < 0$, то $\bar{s} = s^*$.

Оба эти заключения относительно точки \bar{s} не верны, поэтому можно рассматривать двухмерное подпространство $\bar{P} = \text{span}(\bar{s}, \bar{g})$. Множество $\bar{S} \cap \bar{P}$ не пусто, так как вектор $a = -\frac{\delta}{\|\bar{g}\|}\bar{g}$ принадлежит обоим множествам \bar{S} и \bar{P} . Тогда задача минимизации функции f на множестве $\bar{S} \cap \bar{P}$ имеет решение и \bar{f} не может быть нижней границей последовательности $\{f(s_k)\}$.

Следовательно, $\bar{f} = f^*$ и в силу единственности решения задачи (1) $\lim_{k \rightarrow \infty} s_k = s^*$. \square

Преобразуем задачу (5) таким образом, чтобы новая задача оказалась задачей минимизации двухмерной квадратичной функции на круге, и при этом по решению последней можно было бы однозначно восстановить решение задачи (5).

Любой вектор $s \in P_k$ можно представить в виде: $s = \lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k$. Тогда для $s \in P_k$ имеем

$$f(s) = \frac{1}{2}(\lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k)^\top Q(\lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k) + g^\top(\lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k) = \frac{1}{2}\lambda^\top G\lambda + d^\top \lambda,$$

где

$$G = \begin{bmatrix} s_k^\top Q s_k & s_k^\top Q g_k \\ s_k^\top Q g_k & g_k^\top Q g_k \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} g^\top s_k \\ g^\top g_k \end{bmatrix}, \quad \lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

Очевидно, G — положительно определенная матрица. Обозначим через $\varphi(\lambda)$ функцию $\frac{1}{2}\lambda^\top G\lambda + d^\top \lambda$, тогда если векторы $s \in R^n$ и $s \in R^2$ связаны соотношением $s = \lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k$, то $f(s) = \varphi(\lambda)$.

Нетрудно проверить, что

$$G^{-1} = \frac{1}{(g_k^\top Q g_k)(s_k^\top Q s_k) - (s_k^\top Q g_k)^2} \begin{bmatrix} g_k^\top Q g_k & -s_k^\top Q g_k \\ -s_k^\top Q g_k & s_k^\top Q s_k \end{bmatrix}.$$

Далее рассмотрим пересечение шара S и плоскости P_k . Для любого $s \in S \cap P_k$ имеем $\lambda_1^2 \|s_k\|^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 s_k^\top g_k + \lambda_2^2 \|g_k\|^2 \leq \delta^2$ или $\lambda^\top K\lambda \leq \delta^2$, где

$$K = \begin{bmatrix} \|s_k\|^2 & s_k^\top g_k \\ s_k^\top g_k & \|g_k\|^2 \end{bmatrix}.$$

Если LL^\top — разложение Холецкого матрицы K , то $\lambda^\top LL^\top \lambda \leq \delta^2$. Пусть $\xi = L^\top \lambda$, то $\|\xi\|^2 \leq \delta^2$ и $\lambda = L^{-\top} \xi$. Здесь $L^{-\top} = (L^{-1})^\top$. Функция $\varphi(\lambda)$ при $\lambda = L^{-\top} \xi$ равна $\frac{1}{2}\xi^\top L^{-1}GL^{-\top} \xi + d^\top L^{-\top} \xi$. Пусть $H = L^{-1}GL^{-\top}$, $h = L^{-1}d$, $\psi(\xi) = \frac{1}{2}\xi^\top H\xi + h^\top \xi$. Очевидно, H — положительно определенная матрица.

Тогда задача (5) эквивалентна задаче:

$$\text{найти } \min_{\|\xi\| \leq \delta} \psi(\xi), \quad \xi \in R^2. \quad (6)$$

Нетрудно проверить: во-первых, если $\xi \in R^2$, $\lambda = L^{-\top} \xi$, $s = \lambda_1 s_k + \lambda_2 g_k$, то $f(ts) = \varphi(t\lambda) = \psi(t\xi)$ для любого $t \in R$; во-вторых,

$$L = \begin{bmatrix} \|s_k\| & 0 \\ \frac{s_k^\top g_k}{\|s_k\|} & \frac{r}{\|s_k\|} \end{bmatrix}, \quad L^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\|s_k\|} & 0 \\ -\frac{s_k^\top g_k}{r\|s_k\|} & \frac{\|s_k\|}{r} \end{bmatrix},$$

где $r = \sqrt{\|g_k\|^2\|s_k\|^2 - (s_k^\top g_k)^2}$.

2. Решение двухмерной задачи

Пусть $\xi^N = -H^{-1}h$ — точка безусловного минимума функции ψ .

Если $\|\xi^N\| \leq \delta$, то решением задачи (6) является точка ξ^N . В случае возникновения данной ситуации находим $\bar{\lambda} = L^{-\top}\xi^N$, и $\bar{s} = \bar{\lambda}_1 s_k + \bar{\lambda}_2 g_k$ есть точка минимума функции f на подпространстве P_k . Тогда $\|\bar{s}\| \leq \delta$ и \bar{s} — решение задачи (5), но $\nabla f(\bar{s}) \neq 0$ и $\nabla f(\bar{s})$ не лежит в P_k , так как $\bar{s} \neq s^N$. Точку \bar{s} возьмем в качестве s_{k+1} , а $g_{k+1} = \nabla f(\bar{s})$. Векторы s_{k+1}, g_{k+1} линейно независимы, следовательно, на следующей итерации можно решать задачу (5) с $P_{k+1} = \text{span}(s_{k+1}, g_{k+1})$.

Далее рассмотрим случай, когда $\|\xi^N\| > \delta$. В этом случае решением задачи (6) является вектор

$$\xi(\mu) = -(H + \mu I)^{-1}h, \tag{7}$$

где $\mu > 0$ выбрано из условия $\|\xi(\mu)\| = \delta$ [2].

Если h — собственный вектор матрицы H ($Hh = \alpha h$), то

$$\xi(\mu) = -\frac{1}{\alpha + \mu}h \tag{8}$$

и $\mu = \frac{\|h\|}{\delta} - \alpha > 0$, так как $\|\xi^N\| = \frac{1}{\alpha}\|h\| > \delta$. Подставив выражение для μ в (8), получим решение задачи (6): $\xi^* = \xi(\mu) = -\frac{\delta}{\|h\|}h = \frac{\delta\alpha}{\|h\|}\xi^N$, где $\frac{\delta\alpha}{\|h\|} < 1$. Функция $\psi(t\xi^N)$ на отрезке $[0, 1]$ убывает, поэтому $\psi(t\xi^*) > \psi(\xi^*)$ при $0 < t < 1$. Пусть $s_{k+1} = \lambda_1^* s_k + \lambda_2^* g_k$, где $\lambda^* = L^{-1}\xi^*$, тогда $f(ts_{k+1}) = \psi(t\xi^*) > \psi(\xi^*) = f(s_{k+1})$ при $0 < t < 1$. Согласно лемме, векторы $s_{k+1}, g_{k+1} = \nabla f(s_{k+1})$ линейно независимы, и на следующей итерации можно решать задачу (5) с $P_{k+1} = \text{span}(s_{k+1}, g_{k+1})$.

Если h не является собственным вектором матрицы H , то для решения задачи (6) воспользуемся алгоритмом из [4]. Размерность задачи (6) равна двум, поэтому траекторию $\xi(\mu)$ из (7) можно описать в явном виде следующим образом.

Рассмотрим векторы $a_1 = H^{-1}h, a_2 = (H^{-1})^2h$. Они линейно независимы, так как h не является собственным вектором матрицы H . Найдем разложение вектора h по базису $\{a_1, a_2\}$: $h = \gamma_1 a_1 + \gamma_2 a_2$. Если $h^\top = (h_1, h_2), a_1^\top = (a_{11}, a_{12}), a_2^\top = (a_{21}, a_{22})$, то $\gamma_1 = (h_2 a_{11} - h_1 a_{12})/u, \gamma_2 = (h_1 a_{22} - h_2 a_{21})/u$, где $u = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}$. В [4] показано $\gamma_1 > 0, \gamma_2 < 0$, а $\xi(\mu)$ из (7) можно представить в виде:

$$\xi(\mu) = -\frac{\gamma_1 \mu - \gamma_2}{\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2} H^{-1}h - \frac{\gamma_2 \mu}{\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2} (H^{-1})^2 h$$

или

$$\xi(\mu) = -\frac{1}{\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2} ((\gamma_1 a_1 + \gamma_2 a_2)\mu - \gamma_2 a_1) = -\frac{1}{\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2} (\mu h - \gamma_2 a_1).$$

Уравнение

$$\|\xi(\mu)\| = \delta \tag{9}$$

имеет единственное положительное решение [2]. Если μ^* — решение этого уравнения, то вектор $s_{k+1} = \lambda_1^* s_k + \lambda_2^* g_k$ будет являться решением задачи (5), где $\lambda^* = L^{-T} \xi(\mu^*)$. Следовательно, решив уравнение (9), можно получить решение задачи (5).

Очевидно, $f(ts_{k+1}) > f(s_{k+1})$, $0 < t < 1$. Тогда, согласно лемме, векторы s_{k+1} и $g_{k+1} = \nabla f(s_{k+1})$ линейно независимы, и на следующей итерации можно решать задачу (5) с $P_{k+1} = \text{span}(s_{k+1}, g_{k+1})$.

Предлагается следующий алгоритм решения уравнения (9).

Перепишем данное уравнение в виде $\|\mu h - \gamma_2 a_1\| = \delta|\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2|$ и обозначим $\varphi_1(\mu) = \delta|\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2|$, $\varphi_2(\mu) = \|\mu h - \gamma_2 a_1\|$.

При $\mu \geq 0$ имеем $\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2 > 0$, так как $\gamma_1 > 0$, $\gamma_2 < 0$. Тогда $\varphi_1(\mu) = \delta(\mu^2 + \gamma_1 \mu - \gamma_2)$ при $\mu \geq 0$. При этом функция φ_1 — возрастающая и строго выпуклая при $\mu \geq 0$, так как $\varphi_1'(\mu) = \delta(2\mu + \gamma_1) > 0$ и $\varphi_1''(\mu) = 2\delta > 0$.

Функцию φ_2 представим в виде:

$$\varphi_2(\mu) = (\|h\|^2 \mu^2 - 2\gamma_2(h^\top a_1)\mu + \gamma_2^2 \|a_1\|^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Тогда

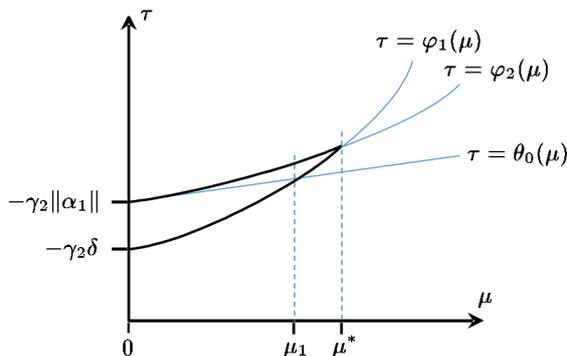
$$\varphi_2'(\mu) = \frac{\mu\|h\|^2 - \gamma_2(h^\top a_1)}{\varphi_2(\mu)}, \quad \varphi_2''(\mu) = \frac{\gamma_2^2(\|h\|^2 \|a_1\| - (h^\top a_1)^2)}{\varphi_2^3(\mu)}.$$

Неравенство $\varphi_2'(\mu) > 0$ следует из неравенств $h^\top a_1 = h^\top H^{-1}h > 0$ и $\gamma_2 < 0$, а строгое неравенство $\varphi_2''(\mu) > 0$ вытекает из неравенства Коши–Шварца $\|h\| \cdot \|a_1\| \geq h^\top a_1$ при условии, что h не является собственным вектором матрицы H . Тогда функция φ_2 — также возрастающая и строго выпуклая при $\mu \geq 0$. Кроме того, $\varphi_2(0) = -\gamma_2 \|a_1\| > \varphi_1(0) = -\gamma_2 \delta > 0$, так как $\|a_1\| = \|\xi^N\| > \delta$.

Тогда при $l = 0, 1, \dots$, в точке μ_l ($\mu_0 = 0$) проводим касательную $\tau = \varphi_2(\mu_l) + (\mu - \mu_l)\varphi_2'(\mu_l)$ к кривой $\tau = \varphi_2(\mu)$. Пусть $\theta_l(\mu) = \varphi_2(\mu_l) + (\mu - \mu_l)\varphi_2'(\mu_l)$, тогда $\varphi_2(\mu) \geq \theta_l(\mu)$ при $\mu \geq \mu_l$, $\theta_l(\mu)$ — возрастающая функция и $\theta_l(\mu_l) = \varphi_2(\mu_l) > \varphi_1(\mu_l)$. Следовательно, $\theta_l(\mu) \geq \varphi_1(\mu)$ при некоторых $\mu > \mu_l$. Если не существует $\mu > \mu_l$ такого, что $\theta_l(\mu) \leq \varphi_1(\mu)$, то для всех $\mu > \mu_l$ $\varphi_2(\mu) \geq \theta_l(\mu) > \varphi_1(\mu)$, чего не может быть, так как известно, что существует решение μ^* уравнения $\varphi_1(\mu) = \varphi_2(\mu)$ при $\mu^* > \mu_l$. Это значит, что существует решение $\mu > \mu_l$ квадратного уравнения $\varphi_1(\mu) = \theta_l(\mu)$, которое возьмем в качестве μ_{l+1} . Если

$$\frac{\varphi_2(\mu_{l+1}) - \varphi_1(\mu_{l+1})}{\varphi_2(\mu_{l+1})} \leq \varepsilon_1, \quad (10)$$

где ε_1 — малое положительное число, то считаем, что уравнение $\|\psi(\mu)\| = \delta$ решено с заданной точностью, и $\mu^* = \mu_{l+1}$ — его решение, в противном случае процесс продолжается.



На рисунке представлен первый шаг решения уравнения $\varphi_1(\mu) = \varphi_2(\mu)$. Множество $\{(\mu, \tau) : \mu \geq 0, \tau \leq \varphi_2(\mu), \tau \geq \varphi_1(\mu)\}$ имеет вид “рога”, загнутого вверх. Необходимо найти μ^* , которому соответствует острый угол “рога”. В точке μ_1 пересекаются кривая $\tau = \varphi_1(\mu)$ и прямая $\tau = \theta_0(\mu)$ — касательная к кривой $\tau = \varphi_2(\mu)$ в точке $\mu_0 = 0$.

3. Тестирование

В данном пункте приводятся результаты решения задачи (1) с помощью четырех алгоритмов: три алгоритма взяты из [2–4], четвертый — из предыдущего пункта данной работы.

Алгоритм из [2] (назовем его A_1) — алгоритм с шагом в виде плоской кусочно-линейной кривой с двумя изломами предложен Пауэллом. Для построения данной кривой используются две точки:

- а) s^c — точка Коши, т. е. $s^c = -\lambda^* g$, где $\lambda^* = \arg \min_{\lambda} f(\lambda g)$;
- б) $\hat{N} = \eta s^N$, где $\eta = 0.2 + 0.8 \frac{\|g\|^4}{(g^T Q g)(g^T Q^{-1} g)}$. Такой выбор η предложили Деннис и Мей [2].

Точки s^c и \hat{N} — точки излома кривой, т. е. кривая состоит из трех отрезков: $[0, s^c]$, $[s^c, \hat{N}]$, $[\hat{N}, s^N]$.

В работе [3] предложен следующий способ выбора направления s :

$$s = u \left(s^c + \frac{\delta}{\|s^N\|} (s^N - s^c) \right),$$

где $u = \frac{\delta}{\|s^c + \frac{\delta}{\|s^N\|} (s^N - s^c)\|}$. Обозначим данный алгоритм через A_2 .

Очевидно, что поиск направления сдвига в алгоритмах A_1 и A_2 ведется в плоскости $\text{span}(g, s^N)$.

В алгоритме из [4] строится кусочно-линейная аппроксимация $\bar{s}(\mu)$ кривой $s(\mu)$ в представлении (4). Для этого находятся числа $0 < \mu_1 < \mu_2$ и точки $s(\mu_1) = s^N - \mu_1 Q^{-1} s^N$, $s(\mu_2) = -\frac{1}{\mu_2} g + \frac{1}{\mu_2} Q g$. Тогда $s(\mu_1)$, $s(\mu_2)$ — точки излома кусочно-линейной кривой $\bar{s}(\mu) : [0, s(\mu_2)]$, $[s(\mu_2), s(\mu_1)]$, $[s(\mu_1), s^N]$. Числа μ_1 , μ_2 выбираются так, чтобы $f(\bar{s}(\mu))$ оказывалась убывающей функцией, а $\|\bar{s}(\mu)\|$ — возрастающей. Алгоритм обозначим через A_3 .

Алгоритм из предыдущего пункта данной работы обозначим через A_4 .

Таким образом, имеются две кривые с двумя изломами каждая. Пусть $R_1 = \|s^c\|$, $R_2 = \|\hat{N}\|$, $R_3 = \|s(\mu_2)\|$, $R_4 = \|s(\mu_1)\|$. Отсортируем их по возрастанию значений и обозначим отсортированные значения $\bar{R}_1 < \bar{R}_2 < \bar{R}_3 < \bar{R}_4$. В результате получим пять отрезков: $[0, \bar{R}_1]$, $[\bar{R}_1, \bar{R}_2]$, $[\bar{R}_2, \bar{R}_3]$, $[\bar{R}_3, \bar{R}_4]$, $[\bar{R}_4, \|s^N\|]$, каждый из которых разобьем на пять равных частей. Границы данных отрезков обозначим через δ_k , $k = 1, 2, \dots, 24$ ($\delta_5 = \bar{R}_1$, $\delta_{10} = \bar{R}_2$, $\delta_{15} = \bar{R}_3$, $\delta_{20} = \bar{R}_4$), которые возьмем в качестве радиусов шаров в тестовых задачах. С помощью каждого из алгоритмов решаем задачу: найти $\min_{\|s\| \leq \delta_k} f(s)$.

Для получения целевой функции $f(s) = \frac{1}{2} s^T Q s + g^T s$ генерируется матрица Q , по заданному распределению собственных значений d_i , $i = 1, 2, \dots, n$, определяется точка Ньютона s^N и вычисляется вектор $g = -Q s^N$.

В данном пункте приводятся результаты решения двух групп задач. Первая группа отличается от другой значениями d_i , $i = 1, 2, \dots, n$: в первой группе $d_i = 1.5 \cdot i$ для всех i , а во второй — $d_i = 10^{-4} + \frac{i-1}{500}$ при $i \leq 500$ и $d_i = d_{500} + 20(i - 500)$ при $i > 500$. Во всех решаемых задачах $n = 1000$, $s_i^N = (-1)^{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Для каждой группы задач определяются по описанному выше алгоритму радиусы шаров δ_k , $k = 1, 2, \dots, 24$, и формируются тестовые задачи.

Расчеты проводились на кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра с процессором E5450 (Harpertown) с тактовой частотой 3 ГГц

Рассмотрим сначала первую группу задач. Число ненулевых элементов в матрице Q равно 996790; $\|s^N\| = 31.6228$, $f(s^N) = -3768.9062$; $R_1 = 1.81667$, $R_2 = 17.76527$, $R_3 = 0.41020$, $R_4 = 15.50045$. Стало быть, $\bar{R}_1 = R_3$, $\bar{R}_2 = R_1$, $\bar{R}_3 = R_4$, $\bar{R}_4 = R_2$.

В таблице 1 приводятся следующие данные: для k -й задачи f_i^* — значение целевой функции, полученное с помощью алгоритма A_i , $i = 1, 2, 3$; $(it)_i$ — число итераций, которые потребовались алгоритму A_4 для получения решения задачи (1) при $\delta = \delta_k$ с начальным приближением $s_0 = s_i^*$, где s_i^* — решение данной задачи, найденное алгоритмом A_i , $i = 1, 2, 3$, т. е. $f_i^* = f(s_i^*)$.

Таблица 1.

k	δ_k	A_1		A_2		A_3	
		f_1^*	$(it)_1$	f_2^*	$(it)_2$	f_3^*	$(it)_3$
1	0.08241	-150.4678	1	-149.2581	1	-148.4992	2
2	0.16408	-293.9838	2	-285.3510	2	-290.9876	2
3	0.24612	-430.5475	2	-405.0327	2	-427.4651	3
4	0.32816	-560.1591	3	-507.8681	2	-557.9318	3
5	0.41020	-682.8186	3	-595.2210	3	-682.3878	3
6	0.69150	-1050.5975	5	-807.4092	4	-836.8078	5
7	0.97279	-1336.6477	6	-940.4019	7	-941.5942	8
8	1.25482	-1540.9693	9	-1036.1706	10	-1037.8366	11
9	1.53537	-1663.5623	12	-1113.2147	14	-1129.7915	15
10	1.81667	-1704.4266	17	-1179.9216	21	-1218.7987	21
11	4.55342	-1714.8035	132	-1673.6443	132	-1983.1277	117
12	7.29018	-1980.3014	281	-2082.1611	281	-2589.7633	216
13	10.02644	-2309.0549	412	-2442.2566	413	-3044.3135	235
14	12.76369	-2601.9239	509	-2758.0151	511	-3347.5601	370
15	15.50045	-2859.1586	574	-3030.4933	576	-3499.7321	503
16	15.95341	-2898.3047	574	-3071.4482	576	-3517.4724	497
17	16.40638	-2936.4748	582	-3111.2297	584	-3534.2064	491
18	16.85934	-2973.6780	590	-3149.8385	592	-3550.0310	484
19	17.31230	-3009.9056	596	-3187.2754	598	-3565.0243	476
20	17.76527	-3045.1608	602	-3223.5413	604	-3579.2499	467
21	20.53677	-3305.7092	620	-3419.9652	624	-3652.1346	399
22	23.30827	-3508.3558	614	-3572.6659	618	-3704.9867	311
23	26.07977	-3653.1069	573	-3681.7017	577	-3741.0713	185
24	28.85127	-3739.9564	479	-3747.1078	483	-3762.0575	4

Далее, тот же набор задач решается с помощью алгоритма A_4 с начальным приближением $s_0 = \frac{\delta_k}{\|s^N\|} s^N$. Результаты решения приведены в сводной табл. 3, в которой it — общее число итераций, за которое найдено решение; f_0 — значение целевой функции в точке, полученной после первой итерации; f^* — оптимальное значение целевой функции.

Рассмотрим вторую группу задач. В матрице Q число ненулевых элементов равно 1000000; $\|s^N\| = 31.622$, $f(s^N) = -6256.6207$; $R_1 = 1.36696$, $R_2 = 29.23741$, $R_3 = 0.30648$, $R_4 = 13.52394$.

Результаты решения задач данной группы содержатся в табл. 2 и 3.

Для решения всех задач первой группы с помощью алгоритмов A_1 , A_2 , A_3 и четырёх раз алгоритмом A_4 с разными начальными приближениями потребовалось 196.3 с процессорного времени, а для решения задач второй группы — 70.2 с. Более подробную объективную статистику по времени привести трудно, так как если для решения задачи номер 21 из первой группы задач (табл. 3) с помощью алгоритма A_4 требуется 4.61 с, а для решения задачи 11 из второй группы — 9.13 с, то для решения задач с помощью каждого из алгоритмов A_1 , A_2 , A_3 необходимо менее 0.01 с. Такие изменения датчик времени, имеющийся у автора, не фиксирует. Для сравнения эффективности алгоритмов A_1 , A_2 , A_3 были использованы более медленные решатели. Результаты расчетов показывают, что для работы этих алгоритмов требуется примерно одинаковое время.

Таблица 2.

k	δ_k	A_1		A_2		A_3	
		f_1^*	$(it)_1$	f_2^*	$(it)_2$	f_3^*	$(it)_3$
1	0.06296	-496.8049	1	-492.5318	1	-493.1282	2
2	0.12259	-970.8217	2	-939.7006	2	-965.1024	2
3	0.18389	-1422.0504	2	-1328.4199	2	-1415.9226	2
4	0.24518	-1850.4909	2	-1655.7099	2	-1845.8880	3
5	0.30648	-2256.1433	3	-1925.7584	3	-2254.1010	3
6	0.51858	-3083.9378	4	-2531.7647	4	-2482.5401	5
7	0.73067	-3238.8891	6	-2846.3758	6	-2622.1526	7
8	0.94277	-3420.9971	8	-3031.5028	9	-2749.9802	11
9	1.15487	-3530.2619	13	-3155.5169	15	-2872.0759	19
10	1.36696	-3666.6836	21	-3247.9207	34	-2990.3165	43
11	3.79836	-3821.6002	1218	-3819.9460	1218	-4173.0262	241
12	6.22976	-4215.3710	448	-4238.7293	448	-5085.4100	143
13	8.66115	-4573.5760	262	-4609.9215	262	-5736.2194	97
14	11.09255	-4896.9738	193	-4941.4725	193	-6126.5107	58
15	13.52394	-5185.7761	156	-5235.1129	156	-6256.5798	1
16	16.66664	-5507.9366	124	-5559.3806	124	-6256.6029	1
17	19.80933	-5772.5147	99	-5821.7402	99	-6256.6107	1
18	22.95202	-5979.5432	78	-6022.3907	78	-6256.6157	1
19	26.09471	-6129.0416	57	-6161.4266	57	-6256.6186	1
20	29.23741	-6221.0206	33	-6238.8982	33	-6256.6204	1
21	29.71447	-6233.8366	29	-6245.2784	29	-6256.6205	1
22	30.19155	-6243.8047	24	-6250.2408	24	-6256.6206	1
23	30.66864	-6250.9247	19	-6253.7852	19	-6256.6207	1
24	31.14570	-6255.1967	13	-6255.9119	12	-6256.6207	1

Таблица 3.

k	1-я группа задач			2-я группа задач		
	it	f_0	f^*	it	f_0	f^*
1	2	-150.4688	-150.4886	2	-496.8049	-496.8416
2	3	-293.9906	-294.1515	3	-970.8218	-971.1167
3	3	-430.5716	-431.1215	3	-1422.0507	-1423.0495
4	4	-560.2193	-561.5393	3	-1850.4917	-1852.8677
5	4	-682.9429	-685.5533	4	-2256.1450	-2260.8029
6	6	-1051.3384	-1064.3663	5	-3483.9479	-3506.8236
7	8	-1339.3656	-1376.9373	7	-4438.9268	-4503.9017
8	11	-1549.3738	-1631.5571	10	-5121.1186	-5263.1065
9	16	-1688.9370	-1837.4136	17	-5530.7077	-5796.7766
10	22	-1778.3439	-2003.9124	42	-5674.3278	-6119.2971
11	134	-2203.5610	-2750.2933	1225	-5791.4417	-6255.3175
12	281	-2515.1080	-3059.0733	448	-5871.6890	-6255.5022
13	412	-2785.0950	-3256.4779	262	-5942.7338	-6255.6995
14	509	-3020.2878	-3400.4068	194	-6006.0693	-6255.8822
15	572	-3222.5698	-3510.8021	156	-6062.0888	-6256.5799
16	574	-3252.9342	-3526.5443	124	-6123.8409	-6256.6030
17	582	-3282.4201	-3541.6486	100	-6173.8574	-6256.6107
18	590	-3311.0292	-3556.1382	78	-6212.0530	-6256.6157
19	596	-3338.7631	-3570.0341	57	-6238.5108	-6256.6187
20	602	-3365.6231	-3583.3557	33	-6253.2496	-6256.6204
21	620	-3511.0054	-3653.2853	29	-6254.4633	-6256.6205
22	614	-3623.9228	-3705.2502	24	-6255.4072	-6256.6206
23	573	-3704.4992	-3741.1079	19	-6256.0814	-6256.6207
24	479	-3752.8105	-3762.0562	13	-6256.4860	-6256.6207

Первая итерация алгоритма A_4 с начальным приближением $s_0 = \frac{\delta_k}{\|s^N\|} s^N$ дает результат, который лучше (по значению функции) результатов алгоритмов A_1, A_2 , так как все решения лежат в плоскости $\text{span}(g, s^N)$, а на первой итерации алгоритма A_4 находится решение $s_1 = \arg \min f(s), s \in \text{span}(g, s^N)$.

При решении задач второй группы с радиусом δ_k ($k \geq 15$) с помощью алгоритма A_3 получены результаты, очень близкие к оптимальным. Значения функций f_3^* и f^* совпадают в первых четырех знаках после запятой и, если отличаются в табл. 2, 3, то только в результате округления. Этим объясняется тот факт, что число итераций $(it)_3$ (в табл. 3 при $k \geq 15$), которые потребовались для дорешивания этих задач с помощью алгоритма A_4 , равно единице.

Все расчеты показывают, что для решения уравнения (9) при $\varepsilon_1 = 10^{-8}$ в неравенстве (10) требуется не более пяти шагов.

Заключение

Эффективность алгоритма A_4 сильно зависит от величины радиуса δ шара S . Задачи с большим и малым значением радиуса шара при любом выборе начального приближения решаются за меньшее число итераций, чем задачи с радиусом, близким к середине отрезка $[0, \|s^N\|]$. Имеется предположение, что это связано с тем, что при δ , близком к $\|s^N\|$, а это будет соответствовать малому μ , направление $s(\mu)$ близко к направлению s^N , а при малом радиусе направление $s(\mu)$ близко к направлению $-g$. Если же δ расположен ближе к середине отрезка $[0, \|s^N\|]$, то на формирование вектора $s(\mu)$ векторы g и s^N оказывают малое влияние, например, в представлении (4) доминирует линейная комбинация векторов $(Q^{-1})^i g$ с большим значением i .

В методе доверительной области возможна комбинация алгоритма A_3 и первой итерации алгоритма A_4 с начальным вектором $s_0 = \frac{\delta_k}{\|s^N\|} s^N$. При больших значениях радиуса доверительной области ($\delta \geq \frac{\|s^N\|}{2}$) шаг можно выбирать с помощью алгоритма A_3 , а при малом δ ($\delta < \frac{\|s^N\|}{2}$) — с помощью алгоритма A_4 .

Литература

1. Hager W.W. Minimizing a quadratic over a sphere // SIAM J. Optim. — 2001. — Vol. 12, iss. 1. — P. 188–208.
2. Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. — М.: Мир, 1988.
3. Забиняко Г.И., Ходаев Ю.В. О применении метода доверительной области к минимизации функций // Тр. Вычислительного центра СО РАН. Сер. Системное моделирование. — Новосибирск. — 1995. — Вып. 3 (21). — С. 47–54.
4. Котельников Е.А. Об одном способе выбора шага в методе доверительной области // Проблемы информатики. — 2013. — Т. 1, № 18. — С. 16–26.

Поступила в редакцию 26 сентября 2013 г.,
в окончательном варианте 20 ноября 2013 г.