Alkalmazott Matematikai Lapok **25** (2008), 61-79.

A MÁSODRENDŰ DIFFERENCIÁLEGYENLETTEL MODELLEZETT OPTIMALIZÁLÓK MEGENGEDETT PARAMÉTEREINEK ELEMZÉSE[1]

HAJBA TAMÁS

A [6] dolgozatban vizsgáltuk néhány másodrendű differenciálegyenlettel modellezett optimalizáló eljárás konvergenciáját. Ebben a dolgozatban azt vizsgáljuk, hogy a konvergencia elégséges feltételeként a paraméterfüggvényekre adott korlátok milyen függvényekkel teljesíthetők. Erre vonatkozóan elemzünk néhány paraméterosztályt. A különböző megengedett paraméterfüggvényekkel néhány tesztfeladaton összehasonlító vizsgálatokat végzünk.

1. Bevezetés

Tekinsük az

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

optimalizálási feladatot, ahol $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvény. Az ilyen feladatok minimumpontjának meghatározására többféle numerikus módszer ismert.

Az iteratív numerikus módszerek egy jelentős része a következő eljáráson alapul: egy adott $x_1 \in \mathbb{R}^n$ kezdő pontból kiindulva egy minimalizáló sorozatot állítunk elő a következőképpen: minden lépésben választunk egy keresési irányt, és ennek mentén lépünk mindaddig, amíg csökken a függvény. A minimalizáló sorozatot tehát az

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad k = 1, 2, \dots \tag{1.1}$$

iterációs sorozat állítja elő, ahol p_k-k a keresési irányok, az α_k paramétereket pedig úgy választjuk meg, hogy

$$\alpha_k \in \operatorname*{argmin}_{\alpha > 0} (x_k + \alpha p_k)$$

teljesüljön. Általános esetben p_k függ egy, esetleg több megelőző ponttól, illetve függhet egy vagy több megelőző keresési iránytól.

[1] Elhangzott a XXVII. Magyar Operációkutatási Konferencián, Balatonőszödön (2007. június 7–9.).

Az egyes módszerek a keresési irányok megválasztásában térnek el. Például a gradiens módszernél

$$p_k = -f'(x_k),$$

a Newton módszernél pedig

$$p_k = -[f''(x_k)]^{-1} f'(x_k),$$

ahol tehát ezeket az irányválasztásokat nem befolyásolják közvetlenül a megelőző keresési irányok, a konjugált gradiens típusú eljárásoknál az irányválasztás $p_{k+1} = g(f'(x_k), f'(x_{k+1}), p_k)$ alakú, ahol g egy vektorfüggvény.

Ha p_k előállítása, mint a gradiens- és a Newton-módszer esetében, kizárólag az x_k iterációs ponttól függ, azaz $p_k = p(x_k)$, és eltekintünk attól, hogy a keresési irány mentén megtaláljuk a minimumot, hanem csak kis lépésekkel megyünk tovább, akkor az (1.1) típusú módszereket tekinthetjük úgy is, mintha a

$$\dot{x} = \alpha(t)p(x), \quad x(0) = x_0 \tag{1.2}$$

differenciálegyenletet oldanánk meg 1 lépéshosszú Euler-módszer segítségével. Az elsőrendű (1.2) differenciálegyenletet az adott módszer *elsőrendű folytonos modell*jének nevezzük.

Ha p_{k+1} előállítása az aktuális x_k ponttól és a megelőző p_k keresési iránytól is függ, és ez utóbbitól lineárisan, akkor az iteratív eljárás (1.1) lépése kiegészül a

$$p_{k+1} = g(x_k) + \beta_k p_k \tag{1.3}$$

lépéssel. (1.1)-(1.3) is tekinthető egy

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \alpha(t)p \\ \dot{p} &= \overline{g}(x, p, t) \end{aligned} \qquad k = 1, 2, \dots \tag{1.4}$$

elsőrendű kezdetiérték feladat, vagy a vele ekvivalens x-ben másodrendű kezdetiérték feladat numerikus integráltjának, ahol $\overline{g}$ egy vektorfüggvény. Az (1.4) differenciálegyenletet az (1.1)-(1.3) iterációs lépésekkel meghatározott módszer *másodrendű folytonos modell*jének nevezzük.

A folytonos modellekkel több cikk is foglalkozik, (pl. [1, 3, 4, 7, 9, 11] stb.), de ezen cikkek szinte kizárólag a gradiens, illetve a Newton-módszert vizsgálták. [2] ugyan tárgyalja egy speciális konstans paraméterű másodrendű differenciálegyenlet trajektóriáinak egy függvény minimumhelyéhez való konvergálását, de a diffegyenletet nem egy diszkrét módszerből, hanem fizikai megfontolásokból származtatja.

2. A vizsgált folytonos modellek

Ebben a fejezetben megadjuk azokat a másodrendű folytonos modelleket, amelyeket a későbbiekben vizsgálunk. Ezeket a Fletcher-Reeves féle konjugált gradiens módszer motiválta.

A Fletcher és Reeves-féle konjugált gradiens módszer [5], mely egy tetszőleges x_0 pontból és $p_0 = -f'(x_0)$ iránnyal indulva előállítja az

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k \\ p_{k+1} &= -f'(x_{k+1}) + \beta_k p_k \end{aligned} \qquad k = 1, 2, \dots$$

pontpárokat, ahol α_k-t úgy választjuk meg, hogy optimális megoldása legyen a $\min\limits_{\alpha \in \mathbb{R}}(f(x_k + \alpha p_k)$ feladatnak; míg a β_k paraméterre több választási lehetőség van, például

$$\beta_k = \frac{||f'(x_{k+1})||^2}{||f'(x_k)||^2}.$$

Látható, hogy ennél a módszernél az új keresési irány az adott pontbeli negatív gradiens és a régi keresési irány kombinációja.

2.1. Általános modell

A Fletcher és Reeves-féle konjugált gradiens módszer folytonos modellje

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \alpha(t)p \\ \dot{p} &= -f'(x + \alpha(t)p) + \beta(t)p \\ x(t_0) &= x_0; \quad p(t_0) = p_0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

alakban írható. Ezt a későbbiekben *általános modell*nek fogjuk nevezni.

Ebben a dolgozatban az általános modellt kizárólag az

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle x, Qx\rangle + \langle c, x\rangle \tag{2.2}$$

kvadratikus célfüggvények esetén vizsgáljuk, ahol az $n \times n$-es Q mátrix pozitív definit. (Itt és a későbbiekben $\langle \cdot, \cdot \rangle$ két vektor skalárszorzatát jelöli.) Az itt vizsgálandó modell tehát

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \alpha(t)p \\ \dot{p} &= -Qx + (\beta(t)I - \alpha(t)Q)p - c \\ x(t_0) &= x_0; \quad p(t_0) = p_0, \end{aligned} \tag{2.3}$$

ahol I az $n \times n$-es egységmátrix.

2.2. Egyszerűsített modell

Minthogy a folytonos modelleknél gyakorlatilag csak kis elmozdulásokat végzünk, a célfüggvény folytonosan differenciálhatóságát feltételezve a modell egyszerűsíthető azzal, hogy a gradienst az $x + \alpha(t)p$ pont helyett az x pontban számítjuk, így az *egyszerűsített modell* a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} &\dot{x} = \alpha(t)p \\ &\dot{p} = -f'(x) + \beta(t)p \\ &x(t_0) = x_0; \quad p(t_0) = p_0. \end{aligned} \tag{2.4}$$

3. Korábbi eredmények

A [6] dolgozatban mind az egyszerűsített, mind az általános modell esetén elégséges feltételeket adtunk az $\alpha(t)$ és $\beta(t)$ paraméterfüggvények közötti kapcsolatra, melyek teljesülése esetén minden trajektória az f függvény minimumpontjához tart. Mivel ezekre az eredményekre a későbbiekben szükségünk lesz, ebben a fejezetben ismertetjük őket.

A (2.4) és (2.1) differenciálegyenletek trajektóriáinak minimumhelyhez konvergálását az *erősen konvex függvény*ek osztályára korlátoztuk.

3.1. Definíció. Egy $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvényt *erősen konvex*nek nevezünk $\kappa > 0$ *konvexitási modulussal*, ha

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) - \kappa\alpha(1-\alpha)||x-y||^2$$
$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n \text{ és } \forall \alpha \in [0,1].$$

Az erősen konvex függvény egyik fontos tulajdonsága, hogy pontosan egy minimumpontja van. Belátható, hogy f pontosan akkor erősen konvex a $\kappa > 0$ konvexitási modulussal, ha a $g(x) = f(x) - \kappa||x||^2$ függvény konvex. Továbbá az egyszer, ill. kétszer folytonosan differenciálható függvények osztályán az erős konvexitás karakterizálható a

$$\langle f'(x) - f'(y), x - y\rangle \geq 2\kappa \parallel x - y \parallel^2 \qquad \forall u, v \in \mathbb{R}^n$$

és

$$\langle f''(x)\xi, \xi\rangle \geq 2\kappa \parallel \xi \parallel^2 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \quad \text{és} \quad \xi \in \mathbb{R}^n$$

egyenlőtlenségekkel. Az utóbbi egyenlőtlenségből következik, hogy minden pozitív definit Q mátrixszal definiált függvény erősen konvex, és a konvexitási modulusa $\kappa = \lambda/2$, ahol λ a Q mátrix legkisebb sajátértéke. Részletesebb ismereteket találhatunk az erősen konvex függvényekről például [8]-ban.

3.1. Az egyszerűsített modell trajektóriáinak konvergenciája

3.1. Tétel. *Tegyük fel, hogy teljesülnek a következő feltételek:*

1. *az $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható erősen konvex függvény $\kappa > 0$ konvexitási modulussal;*

2. $\alpha(t)$ *pozitív, folytonosan differenciálható függvény;*

3. $\beta(t)$ *nempozitív, folytonos függvény;*

4. a) $\dfrac{-\dot{\alpha}(t)}{\alpha(t)} - \alpha(t) \leq 2\alpha(t) + \beta(t) < 0$ *minden* $t_0 < t$*-re;*

b) $-\kappa \leq 2\alpha(t) + \beta(t)$ *minden* $t_0 < t$*-re;*

c) $\int\limits_{t_0}^{\infty} (2\alpha(t) + \beta(t))dt = -\infty.$

Ekkor létezik pontosan egy $x_* \in \mathbb{R}^n$*, melyre*

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = f(x_*)$$

és a (2.4) egyszerűsített modell minden trajektóriájára

$$\lim_{t\to\infty} f(x(t)) = f(x_*), \qquad \lim_{t\to\infty} ||x(t) - x_*|| = 0, \qquad \lim_{t\to\infty} ||p(t)|| = 0.$$

3.2. Az általános modell trajektóriáinak konvergenciája kvadratikus célfüggvény esetén

3.2. Tétel. *Legyen a (2.2) kvadratikus függvényt definiáló* Q *mátrix pozitív definit* 2κ *legkisebb sajátértékkel. Legyen* $x^* \in \mathbb{R}^n$ *a (2.2) kvadratikus függvény minimumpontja. Tegyük fel továbbá, hogy teljesülnek a következő feltételek:*

1. $\alpha(t)$ *pozitív és folytonosan differenciálható függvény;*

2. $\beta(t)$ *nempozitív és folytonos függvény;*

3. *az* $\alpha(t)$ *és* $\beta(t)$ *paraméterek között a következő összefüggések állnak fenn:*

a) $-\dfrac{\dot{\alpha}(t)}{\alpha(t)(\alpha(t)+1)} - \dfrac{2\alpha(t)}{\alpha(t)+1} \leq \alpha(t) + \beta(t) < 0$ *minden* $t_0 < t$ *esetén;*

b) $-\kappa \leq \alpha(t) + \beta(t)$ *minden* $t_0 < t$ *esetén;*

c) $\int\limits_{t_0}^{\infty} (\alpha(t) + \beta(t))dt = -\infty;$

Ekkor (2.3) minden trajektóriájára

$$\lim_{t\to\infty} ||x(t) - x^*|| = 0.$$

4. A paraméterfüggvények választása

A 3.1. és 3.2. tételek elégséges feltételeket adnak az $\alpha(t)$ és $\beta(t)$ paraméterek közti kapcsolatra, melyek teljesülése esetén a (2.4), ill. a (2.3) diffegyenlet minden trajektóriája az f függvény minimum pontjához tart. A paraméterek megválasztásában azonban nagy szabadságunk van. A következőkben azt vizsgáljuk, hogy ha az $\alpha(t)$ paraméterfüggvényt egy adott függvényosztályból választjuk, akkor a $\beta(t)$ milyen választása garantálja a 3.1. és 3.2. tételek feltételeinek kielégíthetőségét.

Vezessük be a következő függvényosztályokat:

$$\begin{aligned}
\mathcal{K} &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : g(t) \equiv konstans\};\\
\mathcal{H}_s &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : \frac{g'(t)}{g(t)} + g(t) = q \ \forall t > 0,\\
&\qquad\qquad g(0) = g_0 > 0,\ q > 0\};\\
\mathcal{H}_g &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : \frac{g'(t)}{g(t)(g(t)+1)} + \frac{2g(t)}{(g(t)+1)} = q\\
&\qquad\qquad \forall t > 0,\ g(0) = g_0 > 0,\ q > 0\};\\
\mathcal{R}(\tau) &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : g(t) = \frac{c}{(t-\tau+1)^b},\ b \neq 0,\ c > 0\};\\
\mathcal{L}(\mathcal{A}) &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : g(t) = Ar(t) + B,\\
&\qquad\qquad r \in \mathcal{A},\ A \in \mathbb{R},\ B \in \mathbb{R}\};\\
\mathcal{L}(\mathcal{A}, \mathcal{R}(\tau)) &= \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^+ : g(t) = Ar(t) + Bs(t),\\
&\qquad\qquad r \in \mathcal{A},\ s \in \mathcal{R}(\tau),\ A \in \mathbb{R},\ B \in \mathbb{R}\};
\end{aligned}$$

ahol $\mathbb{R}^+$ a pozitív számok halmazát, $\mathcal{A}$ pedig a $\mathcal{K}$, $\mathcal{R}(\tau)$, $\mathcal{H}_s$, $\mathcal{H}_g$ függvényosztályok valamelyikét jelöli.

Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk, milyen feltételek mellett lehet

$$(\alpha, \beta) \in \mathcal{A} \times \mathcal{L}(\mathcal{A}) \quad \text{vagy} \quad (\alpha, \beta) \in \mathcal{A} \times \mathcal{L}(\mathcal{A}, \mathcal{R}(\tau)).$$

Látni fogjuk ugyanis, hogy ha az $(\alpha(t),\ \beta(t))$ függvénypárt ezekből az osztályokból választjuk, akkor a 3.1. tétel 4c feltétele nyilvánvalóan teljesíthető.

4.1. Az egyszerűsített modell paramétereinek választása

4.1.1. $\alpha(t) \in \mathcal{K}$

Tegyük fel, hogy az f függvény κ erős konvexitási modulusát ismerjük. Válasszuk a (2.4) modell $\alpha(t)$ paraméterfüggvényét $\mathcal{K}$-belinek, azaz legyen

$$\alpha(t) \equiv \alpha_0, \qquad \alpha_0 > 0.$$

Ekkor a 3.1. tétel 4a-4b feltételei a

$$\max(-\kappa, -\alpha_0) \leq 2\alpha_0 + \beta(t) < 0$$

alakra egyszerűsödnek. Vagyis minden $t > 0$-ra

$$-2\alpha_0 - \min(\kappa, \alpha_0) \leq \beta(t) < -2\alpha_0.$$

1. eset:
Legyen $\beta \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$, azaz

$$\beta(t) = \begin{cases} -(2\alpha_0 + \kappa)A - 2\alpha_0(1 - A) = -2\alpha_0 - \kappa A, & \text{ha } \kappa \leq \alpha_0 \\ -3\alpha_0 A - 2\alpha_0(1 - A) = -(A + 2)\alpha_0, & \text{ha } \kappa > \alpha_0, \end{cases} \tag{4.1}$$

ahol $A \in (0, 1]$.

A (4.1) formulából következik, hogy $\beta(t) < 0$. Másrészt

$$2\alpha(t) + \beta(t) = \begin{cases} -A\kappa, & \text{ha } \kappa \leq \alpha_0 \\ -A\alpha_0, & \text{ha } \kappa > \alpha_0, \end{cases}$$

így a 3.1. tétel 4a feltételének jobboldali egyenlőtlensége és 4c feltétele is teljesül.

Ha az A paraméter befutja a teljes $(0, 1]$ intervallumot, akkor a (4.1) függvények megadják az összes lehetséges $\mathcal{L}(\mathcal{K})$-beli megengedett $\beta(t)$ függvényt.

2. eset:
Legyen $\beta \in \mathcal{L}(\mathcal{K}, \mathcal{R}(0))$, azaz

$$\beta(t) = \begin{cases} A(-2\alpha_0 - \kappa) + B\dfrac{\alpha_0}{(t+1)^b}, & \text{ha } \kappa \leq \alpha_0 \\ -3\alpha_0 A + B\dfrac{\alpha_0}{(t+1)^b}, & \text{ha } \kappa > \alpha_0. \end{cases}$$

$\beta(t)$ a B előjelétől függően monoton csökkenő vagy növekvő.

Az A és B paraméterek értéke a $\beta(0)$-ra és a $\lim\limits_{t\to\infty} \beta(t)$-re adható értékekből határozható meg.

- Ha $\beta(t)$ monoton növekvő és $\kappa \leq \alpha_0$, akkor legyen

  $$\beta(0) = -(2\alpha_0 + \kappa)A + B\alpha_0 = -2\alpha_0 - \kappa$$

  és

  $$\lim_{t\to\infty} \beta(t) = -(2\alpha_0 + \kappa)A = -2\alpha_0.$$

  Innét $A = \dfrac{2\alpha_0}{2\alpha_0 + \kappa}$ és $B = -\dfrac{\kappa}{\alpha_0}$, így

  $$\beta(t) = -2\alpha_0 - \frac{\kappa}{(t+1)^b}.$$

  $\beta(t) < 0$, és mivel $2\alpha(t) + \beta(t) = -\dfrac{\kappa}{(t+1)^b}$, így a 3.1. tétel 4a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 4c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $0 < b \leq 1$.

- Ha $\beta(t)$ monoton növekvő és $\kappa > \alpha_0$, akkor legyen

$$\beta(0) = -3\alpha_0 A + B\alpha_0 = -3\alpha_0$$

és

$$\lim_{t\to\infty} \beta(t) = -3\alpha_0 A = -2\alpha_0.$$

Innét $A = \frac{2}{3}$ és $B = -1$, így

$$\beta(t) = -2\alpha_0 - \frac{\alpha_0}{(t+1)^b}.$$

$\beta(t) < 0$, és mivel $2\alpha(t) + \beta(t) = -\frac{\alpha_0}{(t+1)^b}$, így a 3.1. tétel 4a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 4c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $0 < b \le 1$.

- Ha $\beta(t)$ monoton csökkenő és $\kappa \le \alpha_0$, akkor legyen

$$\beta(0) = -(2\alpha_0 + \kappa)A + B\alpha_0 = -2\alpha_0$$

és

$$\lim_{t\to\infty} \beta(t) = -(2\alpha_0 + \kappa)A = -(2\alpha_0 + \kappa).$$

Innét $A = 1$ és $B = \frac{\kappa}{\alpha_0}$, így

$$\beta(t) = -(2\alpha_0 + \kappa) + \frac{\kappa}{(t+1)^b}.$$

$\beta(t) < 0$, és mivel $2\alpha(t) + \beta(t) = -\kappa + \frac{\kappa}{(t+1)^b}$, így a 3.1. tétel 4a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 4c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $b > 0$.

- Ha $\beta(t)$ monoton csökkenő és $\kappa > \alpha_0$, akkor legyen

$$\beta(0) = -3\alpha_0 A + B\alpha_0 = -2\alpha_0$$

és

$$\lim_{t\to\infty} \beta(t) = -3\alpha_0 A = -3\alpha_0.$$

Innét $A = 1$ és $B = 1$, így

$$\beta(t) = -3\alpha_0 + \frac{\alpha_0}{(t+1)^b}.$$

$\beta(t) < 0$, és mivel $2\alpha(t) + \beta(t) = -\alpha_0 + \frac{\alpha_0}{(t+1)^b}$, így a 3.1. tétel 4a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 4c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $b > 0$.

4.1.2. $\alpha(t) \in \mathcal{R}(0)$

A 3.1. tételben szereplő 4b feltétel bizonyos $t_0 \geq 0$ mellett akkor is teljesíthető minden $t \geq t_0$, ha a κ konvexitási modulus nem ismert. Abban az esetben, ha a $2\alpha(t) + \beta(t)$ függvény monoton növő, és

$$\lim_{t \to \infty} 2\alpha(t) + \beta(t) = 0, \tag{4.2}$$

akkor létezik olyan $t_0 \geq 0$, hogy a 4b feltétel automatikusan teljesül minden $t_0 \geq 0$ esetén. Most ilyen $\alpha(t)$-ra és $\beta(t)$ függvényekre mutatunk példát.

Legyenek $\alpha(t) \in \mathcal{R}(0)$ és $\beta(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{R}(0))$, azaz

$$\alpha(t) = \frac{\alpha_0}{(t+1)^b} \quad \text{és} \quad \beta(t) = -A\alpha(t) + B,$$

ahol $\alpha_0 > 0$, $b > 0$, $A > 0$, $B \in \mathbb{R}$. Ekkor (4.2) miatt a 3.1. tétel 4b feltétele teljesül. Ahhoz, hogy a 4c feltétel teljesüljön, szükséges, hogy $0 < b \leq 1$ és $2\alpha_0 - A\alpha_0 < 0$ teljesüljön. Másrészt, ugyancsak (4.2)-ből következik, hogy $B = 0$.

A 4a feltételének egyenlőtlenségeiből

$$\frac{b}{t+1} \leq (3 - A)\alpha(t),$$
$$(2 - A)\alpha(t) < 0.$$

Ezeknek az egyenlőtlenségeknek $t = 0$-nál is fenn kell állniuk, így, bevezetve az $A\alpha_0 = \beta_0$ együtthatót, kapjuk hogy a

$$\beta(t) = -\frac{\beta_0}{(t+1)^b}$$

függvény a

$$2\alpha_0 < \beta_0 \leq 3\alpha_0 - b$$

feltétel mellett lesz megengedett.

4.1.3. $\alpha(t) \in \mathcal{H}_s$

A $\mathcal{H}_s$ osztályt meghatározó differenciálegyenlet parciális törtekre bontással kiintegrálható, így a $\mathcal{H}_s$-beli $\alpha(t)$-re

$$\alpha(t) = \frac{q}{1 - \left(1 - \frac{q}{\alpha_0}\right) \cdot e^{-qt}}$$

adódik. Könnyen látható, hogy az így kapott $\alpha(t)$ függvény mindig pozitív; $\alpha_0 < q$ esetén monoton növekvő, $\alpha_0 > 0$ esetén pedig monoton csökkenő. (Az $\alpha_0 = q$ esetén $\alpha(t) \equiv q$, konstans függvénnyel egyenlő, így ez a már tárgyalt $\alpha \in \mathcal{K}$ esetet jelenti.)

A 3.1. tétel 4a-4b feltételei most a

$$\max(-q, -\kappa) \leq 2\alpha(t) + \beta(t) < 0$$

alakra egyszerűsödnek, vagyis teljesülnie kell a

$$\begin{aligned} -\kappa - 2\alpha(t) \leq \beta(t) < -2\alpha(t), \quad & \text{ha } \kappa \leq q \\ -q - 2\alpha(t) \leq \beta(t) < -2\alpha(t), \quad & \text{ha } \kappa > q \end{aligned}$$

feltételek valamelyikének.

Az így választott megengedett $(\alpha(t), \beta(t))$ paraméterpárt *határparaméter*nek nevezzük, mivel a 3.1. tétel 4a baloldali és a 4b egyenlőtlenségei közül legalább az egyik egyenlőséggel teljesül, sőt $q = \kappa$ esetén mindkettő.

Legyen $\beta(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_s)$, azaz keressük $\beta(t)$-t

$$\beta(t) = \begin{cases} A(-\kappa - 2\alpha(t)) + (1 - A)(-2\alpha(t)) = -A\kappa - 2\alpha(t), & \text{ha } \kappa \leq q \\ A(-q - 2\alpha(t)) + (1 - A)(-2\alpha(t)) = -Aq - 2\alpha(t), & \text{ha } \kappa > q, \end{cases}$$

alakban, ahol $A \in (0, 1]$.

$\beta(t) < 0$ minden $t > 0$. Másrészt, mivel $2\alpha(t) + \beta(t) = konstans$, így a 3.1. tétel minden feltétele teljesül.

4.2. Az általános modell paramétereinek választása kvadratikus célfüggvény esetén

4.2.1. $\alpha(t) \in \mathcal{K}$

Válasszuk a (2.3) modell $\alpha(t)$ paraméterfüggvényét $\mathcal{K}$-belinek, azaz legyen

$$\alpha(t) \equiv \alpha_0, \quad \alpha_0 > 0.$$

Ekkor a 3.2. tétel 3a-3b feltételei a

$$\max(-\kappa, -2\frac{\alpha_0}{\alpha_0 + 1}) \leq \alpha_0 + \beta(t) < 0$$

alakra egyszerűsödnek. Vagyis minden $t > 0$-ra teljesülnie kell a következő egyenlőtlenségeknek

$$-\alpha_0 - \min(\kappa, \frac{2\alpha_0}{\alpha_0 + 1}) \leq \beta(t) < -\alpha_0.$$

1. eset:
Legyen $\beta \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ az alsó és felső korlátok konvex kombinációja, azaz

$$\beta(t) = \begin{cases} -\alpha_0 - \kappa A, & \text{ha } \kappa \leq \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0 + 1}; \\ -\alpha_0(1 + \dfrac{A}{\alpha_0 + 1}), & \text{ha } \kappa > \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0 + 1}, \end{cases} \tag{4.3}$$

ahol $A \in (0, 1]$.

A (4.3) formulából következik, hogy $\beta(t) < 0$. Másrészt

$$\alpha(t) + \beta(t) = konstans$$

így a 3.2. tétel 3a feltételének jobboldali egyenlőtlensége és 3c feltétele is teljesül.

Ha az A paraméter befutja a teljes $(0, 1]$ intervallumot, akkor a (4.3) függvények megadják az összes lehetséges $\mathcal{L}(\mathcal{K})$-beli megengedett $\beta(t)$ függvényt.

2. eset:
Legyen $\beta \in \mathcal{L}(\mathcal{K}, \mathcal{R}(0))$, azaz

$$\beta(t) = \begin{cases} A(-\alpha_0 - \kappa) + B\dfrac{\alpha_0}{(t+1)^b}, & \text{ha } \kappa \leq \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0+1} \\ -\alpha_0(1 + \dfrac{1}{\alpha_0+1})A + B\dfrac{\alpha_0}{(t+1)^b}, & \text{ha } \kappa > \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0+1}. \end{cases}$$

$\beta(t)$ a B előjelétől függően monoton csökkenő vagy növekvő.

Hasonlóan, mint az egyszerűsített modell esetében, az A és B paraméterek értéke a $\beta(0)$-ra és a $\lim\limits_{t\to\infty} \beta(t)$-re adható értékekből határozható meg. A részletes számolási metódus leírását mellőzve kapjuk $\beta(t)$ választására a következőket:

- Ha $\beta(t)$ monoton növekvő és $\kappa \leq \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0+1}$, akkor

  $$\beta(t) = -\alpha_0 - \frac{\kappa}{(t+1)^b}.$$

  $\beta(t) < 0$, és mivel $\alpha(t) + \beta(t) = -\dfrac{\kappa}{(t+1)^b}$, így a 3.2. tétel 3a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 3c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $0 < b \leq 1$.

- Ha $\beta(t)$ monoton növekvő és $\kappa > \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0+1}$, akkor

  $$\beta(t) = -\alpha_0 - \frac{\alpha_0}{\alpha_0+1}\frac{1}{(t+1)^b}.$$

  $\beta(t) < 0$, és mivel $\alpha(t) + \beta(t) = -\dfrac{\alpha_0}{\alpha_0+1}\dfrac{1}{(t+1)^b}$, így a 3.2. tétel 3a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 3c feltétel pedig pontosan akkor teljesül, ha $0 < b \leq 1$.

- Ha $\beta(t)$ monoton csökkenő és $\kappa \leq \dfrac{2\alpha_0}{\alpha_0+1}$, akkor

  $$\beta(t) = -(\alpha_0 + \kappa) + \frac{\kappa}{(t+1)^b}.$$

  $\beta(t) < 0$, és mivel $\alpha(t)+\beta(t) = -\kappa + \dfrac{\kappa}{(t+1)^b}$, így a 3.2. tétel 3a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 3c feltétel teljesül, ha $b > 0$.

- Ha $\beta(t)$ monoton csökkenő és $\kappa > \frac{2\alpha_0}{\alpha_0+1}$, akkor
$$\beta(t) = -\alpha_0(1+\frac{1}{\alpha_0+1}) + \frac{\alpha_0}{\alpha_0+1}\cdot\frac{1}{(t+1)^b}.$$
$\beta(t) < 0$, és mivel $\alpha(t)+\beta(t) = -\frac{\alpha_0}{\alpha_0+1}(1-\frac{1}{(t+1)^b})$, így a 3.2. tétel 3a feltételének jobboldali egyenlőtlensége teljesül. A 3c feltétel teljesül, ha $b > 0$.

4.2.2. $\alpha(t) \in \mathcal{H}_g$

A $\mathcal{H}_g$ függvényosztályt meghatározó differenciálegyenlet a $z(t) = \frac{1}{\alpha(t)}$ helyettesítéssel kiintegrálható, így, ha $\alpha(t) \in \mathcal{H}_s$, akkor
$$\alpha(t) = \frac{q}{2-q+(\frac{q}{\alpha_0}+q-2)e^{-qt}}$$
alakú.

Könnyen látható, hogy az így kapott $\alpha(t)$ akkor lesz pozitív minden $t \geq 0$ esetén, ha $q \leq 2$.

Az $\alpha(t)$ függvény $\alpha_0 \leq q$ esetén monoton növekvő, $\alpha_0 > 0$ esetén pedig monoton csökkenő.

A 3.2. tétel 3a-3b feltételei most a
$$\max(-q,-\kappa) \leq \alpha(t)+\beta(t) < 0$$
alakra egyszerűsödnek, vagyis teljesülnie kell a
$$\begin{aligned} -\kappa-\alpha(t) \leq \beta(t) < -\alpha(t), &\quad \text{ha } \kappa \leq q \\ -q-\alpha(t) \leq \beta(t) < -\alpha(t), &\quad \text{ha } \kappa > q \end{aligned}$$
feltételek valamelyikének.

Az így választott megengedett $(\alpha(t),\beta(t))$ paraméterpárt itt is *határparaméter*nek nevezzük, mivel a 3.2. tétel 3a baloldali és a 3b egyenlőtlenségei közül legalább az egyik egyenlőséggel teljesül. Itt azonban a mindkét egyenlőtlenség egyidejű egyenlőségként való teljesítése csak akkor lehetséges, ha $q = \kappa \leq 2$.

Legyen $\beta(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_g)$. Keressük $\beta(t)$-t az alulról és felülről korlátozó függvények konvex kombinációjaként
$$\beta(t) = \begin{cases} -A\kappa-\alpha(t), & \text{ha } \kappa \leq q; \\ -Aq-2\alpha(t), & \text{ha } \kappa > q, \end{cases}$$
alakban, ahol $A \in (0,1]$.

$\beta(t) > 0$ minden $t > 0$. Másrészt, mivel $\alpha(t)+\beta(t) = konstans$, így a 3.2. tétel minden feltétele teljesül.

4.2.3. $\alpha(t) \in \mathcal{R}(t_0)$

Ha κ-t nem ismerjük/számoltuk ki, de az $\alpha(t)$ és $\beta(t)$ paramétereket úgy választjuk, hogy

$$\lim_{t\to\infty} \alpha(t) + \beta(t) = 0, \tag{4.4}$$

legyen, akkor létezik olyan $t_0 \geq 0$, hogy a 3.2. tétel 3b feltétele minden $t \geq t_0$ esetén teljesül.

Legyenek $\alpha(t) \in \mathcal{R}(0)$ és $\beta(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{R}(0))$, azaz

$$\alpha(t) = \frac{\alpha_0}{(t+1)^b} \quad \text{és} \quad \beta(t) = -A\alpha(t) + B,$$

ahol $\alpha_0 > 0$, $b > 0$, $A > 0$, $B \in \mathbb{R}$. Ekkor (4.4) miatt a 3.1. tétel 3b feltétele teljesül, továbbá csak a $B = 0$ lehetséges. Ahhoz, hogy a 3c feltétel is teljesüljön, szükséges, hogy $0 < b \leq 1$ és $\alpha_0 - A\alpha_0 < 0$ is teljesüljön.

A $\beta_0 = A\alpha_0$ jelölést bevezetve a 3.1. tétel 3a feltétele

$$b \leq (3\alpha_0 - \beta_0)(1+t)^{1-b} + \alpha_0(\alpha_0 - \beta_0)(1+t)^{1-2b}$$

alakra egyszerűsödik. A $\frac{1}{2} \leq b \leq 1$ választás esetén a jobb oldal a $3\alpha_0 - \beta_0 > 0$ feltétel esetén monoton növekvő; így az egyenlőtlenség akkor teljesül minden $0 \leq t$ esetén, ha

$$\beta_0 \leq \frac{(\alpha_0)^2 + 3\alpha_0 - b}{1 + \alpha_0} \quad \text{és} \quad 3\alpha_0 - \beta_0 \geq 0.$$

Vagyis azt kaptuk, hogy a

$$\beta(t) = -\frac{\beta_0}{(t+1)^b}$$

függvény a

$$\alpha_0 < \beta_0 \leq \min\left(\frac{(\alpha_0)^2 + 3\alpha_0 - b}{1 + \alpha_0}, 3\alpha_0\right) \quad \text{és} \quad \frac{1}{2} \leq b \leq 1$$

feltételek mellett lesz megengedett.

5. Numerikus tesztek

Ebben a fejezetben konkrét numerikus példákon hasonlítjuk össze, hogy a különböző paraméterfüggvények választása hogyan befolyásolja a futási eredményeket.

Az előző fejezet tételeinek értelmében bizonyos feltételek teljesülése esetén az f függvényhez tartozó egyszerűsített/általánosított modell trajektóriái a függvény minimumpontjához tartanak. Ebben a fejezetben ezt felhasználva a következőképpen próbáljuk megkeresni egy függvény minimumpontját: az f-hez tartozó egyszerűsített/általánosított modell differenciálegyenletét a harmadrendű Runge-Kutta módszerrel oldjuk meg addig, míg az aktuális pontban a gradiens normája $0,01$ alá nem csökken. Az így kapott pont a minimumhely egy közelítő értéke lesz (természetesen minél kisebb értéket követelünk meg a gradiens normájára a megállási kritériumban, annál jobb közelítést kapunk). A táblázatok harmadik oszlopában mindig a Runge-Kutta módszer által végzett lépésszámot, a negyedik oszlopban pedig a kapott pontnak az optimumtól való távolságát tüntettük fel. A szükséges számításokat Matlabban írt program segítségével végeztük el.

5.1. Példa. Legyen $f(x,y) = \frac{1}{2}x^2 + xy + y^2 + 2x + 3y$. Ez a függvény erősen konvex a $\kappa = \dfrac{3-\sqrt{5}}{4}$ konvexitási modulussal, továbbá f a (-1,-1) pontban veszi fel a minimumát.

Az egyszerűsített modellt az $x_0 = (-3,2)$ és $p_0 = (-1,-4)$ kezdetiértékekkel használva, a Runge-Kutta-módszerben pedig a lépéshosszt $0,1$-nek választva a kapott eredményeket az 1. táblázat tartalmazza.

$\alpha(t)$	$\beta(t)$	lépésszám	távolság
κ	-3κ	279	$0,0257$
$\dfrac{\kappa}{1-(1-\kappa)e^{-\kappa t}}$	$-2\alpha(t) - \kappa$	278	$0,0258$
$\dfrac{2}{t+1}$	$-\dfrac{5}{t+1}$	204	$0,0255$
$\dfrac{3}{t+1}$	$-\dfrac{8}{t+1}$	264	$0,0259$
$\dfrac{2}{\sqrt{t+1}}$	$-\dfrac{5}{\sqrt{t+1}}$	345	$0,0260$

1. táblázat.

A táblázatból látható, hogy a különféleképpen megválasztott paraméterekkel nagyon hasonló eredményeket kaptunk. Az első két sorban lévő paraméterek határparaméterek voltak, (azaz a 3.1. tétel 4a és 4b feltételei mindig egyenlőséggel teljesülnek), és gyakorlatilag ugyanazt az eredményt produkálták. A következő három sorban lévő paraméterekre a 4b feltétel kezdetben nem teljesül, csak minden $t_0 \leq t$ esetén. Ez a t_0 mindhárom esetben kiszámolható, és az $\alpha(t) = \frac{2}{1+t}$ esetben a legkisebb; az eredményekből leolvasható, hogy e három esetből pontosan ekkor konvergált a leggyorsabban a módszer. Általában is ez várható: ha a 4b feltétel csak egy bizonyos időponttól kezdve teljesül, akkor a módszer csak ettől az időponttól kezdve konvergál, vagyis minél kisebb ez a t_0, annál gyorsabb az algoritmus.

Ennek megfelelően az várhatjuk, hogy az $\alpha(t) = \alpha_0(1+t)^{-b}$ típusú választások annál gyorsabbak lesznek, minél nagyobb az f függvény konvexitási modulusa.

Kipróbálhatjuk azt is, hogy mennyit módosít a futási eredményeken, ha a Runge-Kutta-módszerben megváltoztatjuk a lépéshosszt. A korábbi $0,1$-del szemben $0,05$-nak választva a lépéshosszt a 2. táblázat eredményeit kaptuk.

$\alpha(t)$	$\beta(t)$	lépésszám	távolság
κ	-3κ	557	$0,0259$
$\dfrac{\kappa}{1-(1-\kappa)e^{-\kappa t}}$	$-2\alpha(t)-\kappa$	555	$0,0260$
$\dfrac{2}{t+1}$	$-\dfrac{5}{t+1}$	408	$0,02556$
$\dfrac{3}{t+1}$	$-\dfrac{8}{t+1}$	528	$0,0259$
$\dfrac{2}{\sqrt{t+1}}$	$-\dfrac{5}{\sqrt{t+1}}$	689	$0,0224$

2. táblázat.

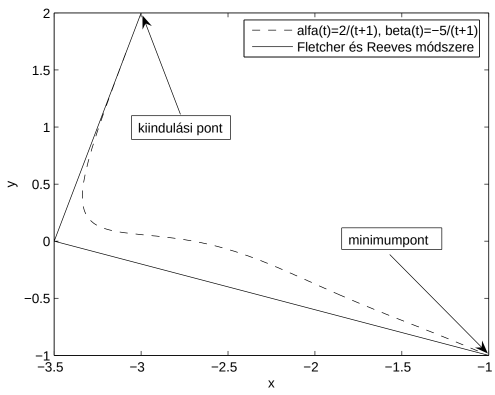
Látható, hogy a lépéshossz megváltoztatásával gyakorlatilag nem értünk el változást; a lépésszám lényegében megduplázódott, és a pontosság sem javult tőle.

Ugyanerre a feladatra az általános modellt alkalmazva $0,1$-es lépéshosszal a 3. táblázat eredményei adódtak.

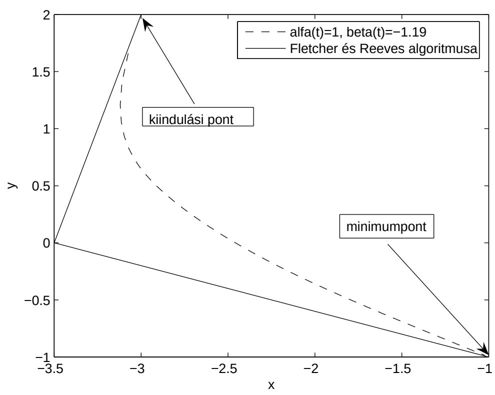
$\alpha(t)$	$\beta(t)$	lépésszám	távolság
1	$-1,19$	299	$0,02260$
$\dfrac{\kappa}{2-\kappa+(2\kappa-2)e^{-\kappa t}}$	$-\alpha(t)-\kappa$	1462	$0,0262$
$\dfrac{1}{\sqrt{t+1}}$	$-\dfrac{1,5}{\sqrt{t+1}}$	915	$0,00261$

3. táblázat.

Az eredményeket az egyszerűsített modell eredményeivel összevetve a legszembetűnőbb változás, hogy az algoritmus lépésszáma minden esetben ”drasztikusan„ megugrott. A pontosságban lényegi változás nem következett be; vagyis azt mondhatjuk, hogy ezen a példán az egyszerűsített modell jobban működött az általánosítottnál. Az 1. és 2. ábrán a két modellhez tartozó trajektóriákat megvizsgálva felfedezhetünk azonban még egy eltérést is. A feladatot az egyszerűsített modellel megoldva a trajektóriában kis hullámzás fedezhető fel, míg az általános modellel kapott megoldásnál ez a hullámzás eltűnik (viszont a konvergencia lassabb).



1. ábra. Egyszerűsített modell



2. ábra. Általános modell

5.2. Példa. Legyen $f(x,y) = x^4+2(x-2)^2+y^4+2(y+2)^2$. Az f függvény erősen konvex a $\kappa = 2$ konvexitási modulussal, a minimumát pedig az $(1,-1)$ pontban veszi fel. Az f-hez tartozó egyszerűsített modellt az $x_0 = (-3,2)$ és $p_0 = (3,-1)$ kezdeti értékekkel oldottuk meg. Az eredményeket a 4. táblázat tartalmazza.

Látható, hogy ebben a példában a konvergencia jóval gyorsabb volt, mint az 1. példában a kvadratikus feladatban. Ennek oka abban keresendő, hogy az előző példában a függvény konvexitási modulusa 0,2 körül volt, míg itt most 2. Általában

$\alpha(t)$	$\beta(t)$	lépésszám	távolság
2	-6	29	0,00053
$\frac{2}{1+e^{-2t}}$	$-2\alpha(t)-2$	31	$0,00053$
$\frac{2}{t+1}$	$-\frac{5}{t+1}$	194	$0,00061$
$\frac{3}{t+1}$	$-\frac{8}{t+1}$	64	$0,00059$

4. táblázat.

is az várható, hogy minél nagyobb az f függvény konvexitási modulusa, a módszer annál gyorsabban konvergál a minimumponthoz.

Az eredményekből továbbá az is kiolvasható, hogy az első, illetve második sorban használt paraméterekkel a módszer lényegében ugyanúgy viselkedett; továbbá mindkét esetben gyorsabban és pontosabb eredményt adtak, mint a 3. és 4. sorban használt paraméterek esetén. Ez azzal magyarázható, hogy az első két esetben a paraméterek határparaméterek voltak, azaz a 3.1. tétel 4a feltételének jobb oldali egyenlőtlensége és a 4b feltétel egyenlőséggel teljesülnek, míg a másik két esetben csak a 4a feltétel teljesül egyenlőséggel. Továbbá a harmadik és negyedik sorbeli paraméterek közül az adott jobb eredményt, amelyiknél a 4b feltételben közelebb vagyunk a határhoz. Általában is elmondható, minél közelebb vagyunk a határhoz, a módszer annál gyorsabban konvergál.

6. Nyitott problémák

Ebben az elemzésben nyilvánvalóan látszik, hogy a Fletcher-Reeves-eljárás folytonosítása akár az általános, akár az egyszerűsített modellel egy sor paraméterrel konvergens lesz, és a paraméterek választása túlságosan nem befolyásolja a konvergencia sebességét. A Fletcher-Reeves-eljárásnak van egy nagyon szép tulajdonsága, nevezetesen n-változós kvadratikus célfüggvény esetén legfeljebb n lépés után véget ér, és az egymást követő irányok Q-konjugáltak. A vizsgált folytonos modelleknél ezek a feltételek nem teljesülnek. Felmerül a következő két kérdés:

- létezik-e olyan paraméter-pár, amelyek mellett véges T idő alatt elérjük az optimumot;
- vannak-e olyan $t_0, t_1, \ldots, t_n$ időpontok, amelyekben a p irányok Q-konjugáltak?

Ezen kérdések megválaszolása még további kutatást igényel.

Hivatkozások

[1] Antipin, A. S.: *Minimization of convex functions on convex sets by means of differential equations*, Differential Equations **30** (1994), N^o9. 1365–1375.

[2] Bahvalov, N. Sz.: *A gépi matematika numerikus módszerei*, Műszaki Kiadó, Budapest, 1977. Oroszból fordítva, az eredeti cikk: Bakhvalov, N. S. *Chislennye metody*, Nauka, 1975.

[3] Evtushenko, Yu. G., Zhadan, V. G.: *Application of the method of Lyapunov functions to the study of convergence of numerical methods.* U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys. **15** (1976) N^o1. 96–108. Oroszból fordítva, az eredeti cikk: Evtushenko, Yu. G., Zhadan, V. G. *Primeneniya metoda funktsiĭ Lyapunova dlya issledovaniya skhodimosti chislennykh metodov*, Zh. vychisl. mat. i mat. fiz. **15** (1975), N^o1., 101–112.

[4] Flåm, S. D.: *Solving convex programming by means of ordinary differential equations*, Mathematics of Operations Research **17** (1992), N^o2., 290–302.

[5] Fletcher, R., Reeves, C. M.: *Function minimization by conjugate gradients*, Comput. J. **7** (1964), 149–154.

[6] Hajba, T.: *Optimization methods modeled by second order differential equation*, Annales Univ. Sci. Budapest, Sect. Comp. **26** (2006), 145–158.

[7] Hauser, R., Nedić, J.: *The continuous Newton-Raphson method can look ahead*, SIAM J. Optim. **15** (2005), N^o3, 915-925.

[8] Kovács, M.: *A nemlineáris programozás elmélete*, Typotex, 2000.

[9] Kovács, M.: *Continuous analog of gradient-type iterative regularization.* J. Mosc. Univ. Comput. Math. Cybern. **3** (1979), 37–44. Oroszból fordítva, az eredeti cikk: Kovach, M., *NVestnik Mosk. un-ta, Ser.* XV. *Vychisl. mat. i kibern.* **3** (1979), 36–42.

[10] Kovács, M.: *Some convergence theorems on nonstationary minimization precesses.* Math. Operationsforschung u. Statist. **15** (1984), N^o2, 203-210.

[11] Venec, V. I., Rybashov M. V.: *The method of Lyapunov function in the study of continuous algorithms of mathematical programming.* U.S.S.R. Comput. Math. Math. Phys. **17** (1977), 64–73. Oroszból fordítva, az eredeti cikk: Venets, V. I., Rybashov, M. V., *Metod funktsiĭ Lyapunova v issledovanii nepreryvnykh algoritmov matematicheskogo programmirovaniya.* Zh. vychisl. mat. i mat. fiz. **17** (1977), N^o3., 622-633.

(Beérkezett: 2007. október 15.)

HAJBA TAMÁS
SZÉCHENYI ISTVÁN EGYETEM
MŰSZAKI TUDOMÁNYI KAR MATEMATIKA ÉS SZÁMÍTÁSTUDOMÁNY TANSZÉK
9026 GYŐR, EGYETEM TÉR 1.
e-mail: hajbat@sze.hu

PARAMETER ANALYSIS OF OPTIMIZATION METHODS MODELED BY SECOND ORDER DIFFERENTIAL EQUATION

Tamás Hajba

In [6] the convergence of some optimization methods modeled by second order differential equation have been studied. In this paper we introduce some class of functions and analyze which functions belonging to these classes satisfy the sufficient conditions of the convergence. Finally, we illustrate the obtained results on numerical examples.