УДК 512.25/26+513.88

МЕТОД РАЗДЕЛЬНЫХ ШАГОВ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ОВРАЖНЫХ ФУНКЦИЙ

В.В.Калашников

В данной работе рассматривается новый метод решения задачи безусловной минимизации

$$\min_{x\in\Omega} f(x),$$

где функция $f:\Omega\in R^n\to R$ непрерывно дифференцируема на $\Omega\subset R^n$ – открытом выпуклом множестве, содержащем такую точку x^*, что $\nabla f(x^*)=0$. Пусть в точке x^* функция f дважды непрерывно дифференцируема и матрица $f''(x^*)$ положительно определена, т.е. x^* – точка безусловного минимума функции f.

Нас, в частности, интересует класс плохо обусловленных задач, в которых число обусловленности матрицы $f''(x^*)$, обозначаемое $cond(f''(x^*))^*$, очень велико. Известно, какие трудности создает это обстоятельство в работе обычных методов минимизации. Плохо обусловленные задачи часто возникают на практике из-за неудачного масштабирования переменных. Иногда предлагается в случае плохой работы метода изменить масштаб переменных, но неясно, как это делать, особенно если число переменных велико. К тому же, плохообусловленность может возникать и по другим причинам. Так, например, известно, что в методе штрафных функций по мере приближения к условному минимуму соответствующие безусловные задачи становятся все более плохо обусловленными. В 1970 году Н.З.Шор [I] предложил для преодоления указанной трудности производить перед каждым шагом метода градиентного спуска растяжение пространства R^n вдоль направления разности последовательных градиентов $[\nabla f(x_{k+1})-\nabla f(x_k)]$, что уменьшает в какой-то степени овражность поверхностей уровня функции f.

Многие авторы предлагают различные методы борьбы с плохой обусловленностью в задачах минимизации. Так, например, Пауэлл [2] предложил комбинировать квазиньютоновские направления с направлениями наискорейшего спуска в сочетании с очень тщательной процедурой контроля за длиной шага. Орен и Люнбергер [3] и Орен [4] пытаются применить квазиньютоновский метод, в котором формулы пересчета минимизируют число обусловленности некоторых нужных матриц. Дэвидон [5] развивает дальше этот подход, а Деннис и Мей [6] комбинируют схему пересчета Дэвидона с модифицированной стратегией Пауэлла сочетания наискорейшего спуска и метода Ньютона.

Непосредственным толчком для данной работы послужила статья Боггза [7], в которой предлагается метод минимизации овражной функции путем интегрирования на каждом шаге соответствующей "жесткой" дифференциальной системы градиентного спуска $\dot{x} = -\nabla f(x), x(0)=\xi$. Для этого в [7] используется упрощенный вариант метода интегрирования "жесткой" системы дифференциальных уравнений [8], основанного на теории асимптотического поведения решений систем сингулярно возмущенных дифференциальных уравнений, или систем дифференциальных уравнений с малыми параметрами при производных. Эта теория развивается с 1950-х годов усилиями многих авторов. Достаточно упомянуть работы А.Н.Тихонова [9], Л.С.Понтрягина [10], М.И.Вишика и Л.А.Люстерника [11], А.Б.Васильевой [12,13], А.Б.Васильевой и В.Ф.Бутузова [14] и др.

Суть метода в следующем. В системе $\dot{x}=-\nabla f(x), x(0)=\xi$ с помощью некоторого критерия компоненты переменного x разделяются на так называемые сингулярные (грубо говоря, это x_i с такими индексами i, что величина $|(\nabla f(x))_i|$ велика по сравнению с другими компонентами градиента) и несингулярные. Соответствующие частичные векторы обозначаются через z и y, так что $x^T=(y^T, z^T)$, а дифференциальная система принимает вид

$$\begin{cases} \dot{y} = -\nabla_y f(y,z), \ y(0)=\xi, \\ \dot{z} = -\nabla_z f(y,z), \ z(0)=\eta. \end{cases}$$

Вместо нее предлагается решать на некотором отрезке дифференциально-алгебраическую систему

$$\begin{cases} \dot{y} = -\nabla_y f(y,z), \ y(0)=\xi, \\ 0 = -\nabla_z f(y,z), \end{cases}$$

в которой дифференциальная подсистема уже не должна быть "жесткой", а затем снова произвести разделение компонент и т.д.

Боггз не доказывает сходимости своего метода. Кроме того, недостатком является также существенная зависимость метода от выбранной системы координат в R^n, которая может, вообще говоря, и не соответствовать направлениям оврага поверхностей уровня функции f.

В §I настоящей статьи описывается не зависящий от системы координат алгоритм выбора "плохих" и "хороших" направлений, образующих базис некоторого подпространства в R^n и названных по аналогии с [7] сингулярными и несингулярными соответственно, а также указывается способ раздельных шагов по ним от точки x_k к точке x_{k+1}. В §2 исследуется сходимость к точке минимума выпуклой функции f последовательности $\{x_k\}$, порожденной методом, а в §3 получена оценка скорости сходимости точек x_k к точке x^* минимума квадратичной целевой функции f для одного из вариантов метода. Наконец, §3 посвящен обсуждению реализации метода и результатов проведенных экспериментов.

§I. Описание метода раздельных шагов

I. Начинаем с произвольного $x_0 \in R^n$. На протяжении всего процесса фиксированы постоянные q, $0<q<1/2$, и $\varepsilon>0$.

2. К началу $(k+1)$-го шага имеем $x_k \in R^n$, $f(x_k)$, $f'(x_k)$, матрицу P_l размером $n \times l$, столбцами которой являются накопленные к данному моменту ортонормальные векторы сингулярных направлений $p_1, p_2, \ldots, p_l$ $(l \le n)$. Если $l=0$, то P_l – нулевая матрица. Кроме того, имеется $(l \times l)$-матрица H_l^{-1} (в зависимости от того, сохранились или нет сингулярные направления предыдущего k-го шага, матрица H_l^{-1} ненулевая или нулевая), где H_l – приближение матрицы вторых производных функции f по направлениям $p_1, p_2, \ldots, p_l$. Есть также начальная длина шага $\alpha_0>0$ и константы $\delta \ge \frac{1-q}{\alpha_0}$, $\Delta>\delta<0$.

Проверяем условие $|f'(x_k)| \le \varepsilon$. Если оно выполнено, то процесс закончен, x_k – искомое решение, если нет – переходим на 3.

3. Находим несингулярное направление p_{l+1} в виде $p_{l+1} = -(E - P_l P_l^T) f'(x_k)$, где E – единичная матрица. Если $l=n$ или $|p_{l+1}| \le \varepsilon$, то переходим на 4, в противном случае – на 6.

4. Как будем видно после полного описания метода, в этом пункте известна либо H_l^{-1}, либо только H_{l-1}^{-1}. В первом случае переходим на 5, в последнем случае вычисляем $f'(x_k + t p_l)$,

где $t>0$ достаточно малое, а затем находим

$$\mathcal{Z}_\ell = \frac{f'(x_k + tp_\ell) - f'(x_k)}{t} \approx f''(x_k)p_\ell .$$

Ясно, что

$$p_j^T \mathcal{Z}_\ell = \frac{\partial^2 f}{\partial p_j \partial p_\ell}(x_k),\ j=\overline{1,\ell}.$$

После этого по общеизвестным формулам пересчитываются H_ℓ^{-1} и $\det(H_\ell)$. H_ℓ получается из $H_{\ell-1}$ окаймлением

$$H_\ell = \left(\begin{array}{c|c} H_{\ell-1} & \begin{matrix} p_1^T \mathcal{Z}_\ell \\ \vdots \end{matrix} \\ \hline \mathcal{Z}_\ell^T p_1 \ldots & p_\ell^T \mathcal{Z}_\ell \end{array}\right)$$

а $H_{\ell-1}^{-1}$ и определитель $\det(H_{\ell-1})$ известны. Если выполняется пара неравенств $\Delta \geq \det(H_\ell) \geq \delta$, то переходим на 5, в противном случае аннулируем все сингулярные направления, т.е. зануляем матрицы P_ℓ и H_ℓ^{-1}, делим пополам α_0 и δ, увеличиваем вдвое Δ и затем переходим на 3.

5. Определяем направление $Z_\ell = -P_\ell H_\ell^{-1} P_\ell^T f'(x_k)$ квазиньютоновского шага по сингулярным направлениям и отыскиваем $x_{k+1} = x_k + \beta_k Z_\ell$, где β_k дает решение задачи $\min\limits_{\beta\in R} f(x_k+\beta Z_\ell)$. Производя необходимые для очередного шага перевычисления и решив вопрос о сохранении для следующего шага или аннулировании накопленных сингулярных направлений, переходим на 2.

6. Делаем пробный вспомогательный шаг $x_{k,\ell} = x_k + \alpha_0 p_{2\ell}$. Если выполняется условие

$$f(x_{k,\ell}) \leq f(x_k) - \alpha_0 q |p_{2\ell}|^2, \qquad \text{(I.I)}$$

то переходим на 4 и проделываем все требуемые там действия, заменив лишь x_k на $x_{k,\ell}$ в определении x_{k+1}. Если же (I.I) нарушено, то переходим на 7.

7. Подсчитываем величину

$$A = 2\cdot \frac{f(x_{k,\ell}) - f(x_k) + \alpha_0 |p_{2\ell}|^2}{\alpha_0^2 |p_{2\ell}|^2}$$

и сравниваем ее с S. Если $A \leq S$, то дробим α_0 пополам и переходим на 6. В случае $A > S$ подсчитываем $f'(x_{k,\ell})$ и вектор $p'_{2(\ell+1)} = -(E - P_\ell P_\ell^T) f'(x_{k,\ell})$, а затем определяем $(\ell+1)$-е сингулярное направление $p_{\ell+1}$ как $p_{\ell+1} = \frac{p_{2\ell} - p'_{2(\ell+1)}}{|p_{2\ell} - p'_{2(\ell+1)}|}$.
Если известна к данному моменту матрица H_ℓ^{-1}, то переходим на 3, дополнив матрицу P_ℓ до $P_{\ell+1}$ столбцом $(\ell+1)$-го сингуляр-

ного направления. Если же известна лишь матрица H_{l-1}^{-1}, то переходим на 8.

8. Пусть $x_{k,l} = x_k + \alpha_\mu p_{l}$. Заметим, что $p_{2l} = p_{2(l-1)} - \gamma_l p_l$, где $\gamma_l = -p_l^T f'(x_k)$, а $p_{2(l-1)} = -(E - P_{l-1} P_{l-1}^T) f'(x_k)$. Тогда, очевидно, $f'(x_{k,l}) - f'(x_k) = \alpha_\mu F \cdot p_{2l} = \alpha_\mu F \cdot p_{2(l-1)} - \alpha_\mu \gamma_l p_l$, где $F = f''(x_k + \theta(x_{k,l} - x_k)),\ 0 < \theta < 1$, и поэтому можно найти $\mathcal{L}_l \approx f''(x_k) p_l$ в виде $\mathcal{L}_l = [-f'(x_{k,l}) + f'(x_k) + \alpha_\mu F \cdot p_{2(l-1)}] / \gamma_l \alpha_\mu$. Здесь $f'(x_k), f'(x_{k,l}), \alpha_\mu, \gamma_l$ известны, а вместо $F \cdot p_{2(l-1)}$ можно подставить его приближенное выражение $F \cdot p_{2(l-1)} \approx [f'(x_k + \alpha_\nu p_{2(l-1)}) - f'(x_k)] / \alpha_\nu$, где $f'(x_k + \alpha_\nu p_{2(l-1)}) = f'(x_{k,l-1})$ нам известно, коль скоро мы ранее должны были найти p_l (l-е сингулярное направление). Зная теперь $p_j^T \mathcal{L}_l,\ j = \overline{1,l}$, находим H_l^{-1} и $\det(H_l)$ и, проверяя соотношения $\Delta \geq \det(H_l) \geq \delta$, переходим на 3, сохранив полученную матрицу H_l^{-1}, если указанные соотношения выполнены, и аннулировав сингулярные направления и преобразовав константы α_0, δ, Δ, как в п.4, если соотношения нарушены.

Из описания алгоритма ясно, что если матрица $f''(x_k)$ положительно-определенная, то дробление α_0 и δ не может продолжаться бесконечно, следовательно, через конечное число вспомогательных шагов мы обязательно попадем в п.4 и закончим очередной шаг, определив x_{k+1}, так как матрица H_l^{-1} тоже положительно-определенная.

Хотя формально соответствующих предположений и не делается, метод ориентирован на случай, когда подпространство овражности имеет сравнительно небольшую размерность, а максимальные собственные числа гессиана функции f имеют разные порядки. Как видно из описания, на каждом шаге метода число r вычислений градиента на единицу превосходит число новых сингулярных направлений (сингулярные направления предыдущего шага сохраняются на последующем шаге за исключением некоторых случаев восстановления).

§2. Сходимость метода раздельных шагов

Пусть целевая функция f принадлежит классу $C^2(R^n)$ и выполняется условие

$$(f''(x)y, y) \geq m|y|^2;\ m > 0\ ,\ \text{для всех}\ x, y \in R^n. \tag{2.1}$$

Завершение $(k+1)$-го шага метода происходит следующим образом.

а) Сначала сдвигаемся из точки x_k в точку $x_{k,1}=x_k+\alpha_k P_{2l}$, если $|P_{2l}|>\varepsilon$, где α таково, что выполняется условие

$$f(x_{k,1})\le f(x_k)-\alpha_k q|P_{2l}|^2. \qquad (2.2)$$

Если же $|P_{2l}|\le\varepsilon$, то $x_{k,1}=x_k$.

б) Затем сдвигаемся из точки $x_{k,1}$ в точку x_{k+1} по квазиньютоновскому направлению $z_l: x_{k+1}=x_{k,1}+\beta_k z_l$, где β_k дает решение задачи

$$\min_{\beta\in R} f(x_{k,1}+\beta z_l), \text{ а } z_l=-\mathbb{P}_l H_l^{-1}\mathbb{P}_l^T f'(x_k). \qquad (2.3)$$

Очевидно поэтому, что всегда $f(x_{k,1})\le f(x_k)$. Следовательно, если лебеговы множества функции f ограничены, то последовательность порожденных алгоритмом точек $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ заключена в компакте $K=\{x\in R^n: f(x)\le f(x_0)\}$. Очевидно, $(f''(x)y,y)\le\le M|y|^2, x,y\in K$. Поэтому если $|P_{2l}|>\varepsilon$, то дробление α_0, производимое в п.6 описания метода для получения α_k, удовлетворяющего (2.2), не может продолжаться бесконечно. В самом деле, $\langle f'(x_k),P_{2l}\rangle=-|P_{2l}|^2$; следовательно, если $\bar{x}=x_k+\alpha P_{2l}$, то $f(\bar{x})=f(x_k)-\alpha|P_{2l}|^2+\frac{\alpha^2}{2}(f''_{cp}P_{2l},P_{2l})\le f(x_k)-\alpha|P_{2l}|^2+\frac{\alpha^2}{2}M|P_{2l}|^2$. Это выражение меньше, чем $f(x_k)-\alpha q|P_{2l}|^2$, если $\alpha\le 2(1-q)/M$. Значит, α_k заведомо больше, чем $\bar{\alpha}=(1-q)/M$.

ЛЕММА. Пусть для $f\in C^2(R^n)$ выполнено условие (2.I). Обозначим P_{2l} на $(k+1)$-м шаге через P_{2l}^k, z_l - через z_l^k. Тогда $\alpha_k|P_{2l}^k|\to 0, \beta_k|z_l^k|\to 0$ при $k\to\infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В случае нетривиальности подшага а) имеем неравенство $f(x_k)-f(x_{k,1})\ge\alpha_k q|P_{2l}^k|^2$. А так как $f(x_{k+1})\le\le f(x_{k,1})$, то тем более выполняется неравенство $f(x_k)-f(x_{k+1})\ge\ge\alpha_k q|P_{2l}^k|^2$. Поэтому если бы для какой-то подпоследовательности номеров $k_s\to\infty$ и какого-то $c>0$ имело место неравенство $\alpha_{k_s}|P_{2l}^{k_s}|\ge c$, то последовательность $\{f(x_{k_s})\}_{s=1}^\infty$ неограниченно убывала бы, что невозможно в силу условия (2.I). Далее, выпуклость функции f влечет неравенство $f(x_{k,1})-f(x_k)\ge\ge\alpha_k\langle f'(x_k),P_{2l}^k\rangle=-\alpha_k|P_{2l}^k|^2$. Значит, $0\le f(x_k)-f(x_{k,1})\le\alpha_k|P_{2l}^k|^2\to 0$ при $k\to\infty$. Далее, применяя формулу Тейлора и снова условие (2.I), получаем $f(x_{k,1})=f(x_k)+\alpha_k\langle f'(x_k),P_{2l}^k\rangle+\frac{\alpha_k^2}{2}(f''_{cp}P_{2l}^k, P_{2l}^k)\ge f(x_k)-\alpha_k|P_{2l}^k|^2+\frac{\alpha_k^2}{2}m|P_{2l}^k|^2$. Отсюда вытекает неравенство $\alpha_k^2|P_{2l}^k|^2\le\frac{2}{m}[f(x_{k,1})-f(x_k)+\alpha_k|P_{2l}^k|^2]\to 0$ при

$k\to\infty$. Итак, $\alpha_k|P_{2l}^k|\to 0$ при $k\to\infty$. Первая часть утверждения леммы доказана. Заметим еще, что так как лебеговы множества функции f ограничены, то $|P_{2l}^k|\to 0$ при $k\to\infty$, так как мы показывали, что $\alpha_k\ge\bar{\alpha}>0$.

Далее, условие (2.3) в подшаге б) влечет за собой равенство $\langle f'(x_{k+1}), z_l^k\rangle = 0$. Поэтому, как и выше, имеем $f(x_{k,1}) = f(x_{k+1}) + \frac{1}{2}\beta_k^2(f''_{cp} z_l, z_l) \ge f(x_{k+1}) + \frac{m}{2}\beta_k^2|z_l^k|^2$. Значит, $0\le|\beta_k||z_l^k|\le \sqrt{\frac{2}{m}[f(x_{k,1})-f(x_{k+1})]} \le \sqrt{\frac{2}{m}[f(x_k)-f(x_{k+1})]}\to 0$ $(k\to\infty)$ в силу монотонности и ограниченности снизу последовательности $\{f(x_k)\}_{k=0}^{\infty}$. Тем самым лемма полностью доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ. Так как $f'\in C^1(K)$, где K - компакт, то $|f'(x)-f'(y)|\le L_K|x-y|$, $x,y\in K$, L_k не зависит от x, y.

ТЕОРЕМА I. Если для функции $f\in C^2(R^n)$ выполняется условие (2.I), то последовательность точек, порожденная описанным в §I методом, сходится к x^* - точке безусловного минимума функции f, а $f(x_k)\to f(x^*)$ при $k\to\infty$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $\varepsilon>0$ произвольное. Так как последовательность точек $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ заключена в компакте $K=\{x\in R^n: f(x)\le f(x_0)\}$, то из нее можно выбрать сходящуюся подпоследовательность $x_{k_s}\to x^*\in R^n$, $s\to\infty$. Начиная с некоторого s_0 на k_s-тых шагах, в силу непрерывности производных функции f и показанной в §I положительной определенности матрицы H_l^{-1}, выполняется неравенство $|z_l^{k_s}|\le G$ (так как $|z_l^k|\le\|P_lH_l^{-1}P_l^T\|\cdot|f'_l(x_k)|$), а также для некоторого $\delta_0>0$ будет $\delta_0|P_l^Tf'(x_{k_s})|^2\le[f'(x_{k_s})]^T\cdot P_lH_l^{-1}P_l^Tf'(x_{k_s}) = |\langle f'(x_{k_s}), z_l^{k_s}\rangle| = |\langle f'(x_{k_s}) - f'(x_{k_s+1}), z_l^{k_s}\rangle|$, так как $\langle f'(x_{k_s+1}), z_l^{k_s}\rangle=0$ в силу условия (2.3). Продолжая цепочку неравенств, $|\langle f'(x_{k_s})-f'(x_{k_s+1}), z_l^{k_s}\rangle|\le|f'(x_{k_s})-f'(x_{k_s+1})|\cdot|z_l^{k_s}|\le L_K\cdot[\alpha_{k_s}|P_{2l}^{k_s}|+|\beta_{k_s}|\cdot|z_l^{k_s}|]\cdot G$ в силу замечания I. Отсюда $\sum_{j=1}^{l}\langle f'(x_{k_s}),P_j\rangle^2 = |P_l^Tf'(x_{k_s})|^2\le\frac{L_K}{\delta_0}\cdot G\cdot[\alpha_{k_s}|P_{2l}^{k_s}|+|\beta_{k_s}|\cdot|z_l^{k_s}|]$. Подобрав s_1 таким образом, чтобы для всех $s>s_1$ выполнялось $\alpha_{k_s}|P_{2l}^{k_s}|<\frac{\varepsilon^2\cdot\delta_0}{4GL_K}$ и $|\beta_{k_s}|\cdot|z_l^{k_s}|<\frac{\varepsilon^2\cdot\delta_0}{4G\cdot L_K}$ (это можно сделать в силу леммы I), получим, что для $s>s_2=\max\{s_0,s_1\}$ выполняется неравенство $\sum_{j=1}^{l}\langle f'(x_{k_s}),P_j\rangle^2<\frac{\varepsilon^2}{2}$. Выбрав s_3 так, чтобы для всех $s>s_3$ было справедливо

соотношение $\langle f'(x_{k_s}), \frac{P_{2l}^{k_s}}{|P_{2l}^{k_s}|}\rangle^2 = |P_{2l}^{k_s}|^2 < \frac{\varepsilon^2}{2}$, получим, что при $s > s_4 = max\{s_2, s_3\}$ верно неравенство $|f'(x_{k_s})| < \varepsilon$, так как $|\mathbb{P}_l^T f'(x_{k_s})|^2 = |\mathbb{P}_l \mathbb{P}_l^T f'(x_{k_s})|^2$, а $|P_{2l}^{k_s}|^2 = |(E - \mathbb{P}_l \mathbb{P}_l^T) f'(x_{k_s})|^2$ и $\mathbb{P}_l \mathbb{P}_l^T$ - ортогональный проектор; в силу непрерывности f' отсюда следует, что $f'(x^*) = 0$. В сочетании с условием (2.I) это означает, что точка x^* есть точка безусловного минимума функции f. Поэтому x^* - единственная предельная точка последовательности $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$, а из этого и из компактности K легко следует, что сама последовательность $\{x_k\}$ сходится к точке x^*, а значит, и $f(x_k) \to f(x^*)$ при $k \to \infty$. Теорема доказана.

§3. Скорость сходимости метода

Мы рассмотрим применение нашего метода к квадратичной целевой функции f. Не ограничивая общности, можем считать, что $f(x) = \frac{1}{2}(Dx, x)$, где D - положительно определенная матрица,и для всех $x \in R^n$ выполняется $M|x|^2 \geq (Dx, x) \geq m|x|^2$, где M, m - наибольшее и наименьшее собственные числа матрицы D. Ясно, что точкой минимума f является $x^* = 0$.

Пусть на $(k+1)$-м шаге мы имеем матрицу $\mathbb{P}$, столбцы которой являются векторами сингулярных направлений, и пусть P_{2l} - вектор несингулярного направления. Будем считать, что шаг по P_{2l} осуществляется так, что точка $x_{k,1} = x_k + \alpha_k P_{2l}$ является точкой минимума функции $f(x_k + \alpha P_{2l}) = \varphi(\alpha)$ при $\alpha \in R$. Тогда $\alpha_k = -\frac{\langle f'(x_k), P_{2l}\rangle}{\langle D P_{2l}, P_{2l}\rangle}$. Затем, делая шаг по сингулярным направлениям, имеем $x_{k+1} = x_{k,1} + \mathbb{P}_z$, причем в силу (2.3) выполняется равенство $\mathbb{P}^T D x_{k+1} = \mathbb{P}^T f'(x_{k+1}) = 0 = \mathbb{P}^T f'(x_{k,1}) + \mathbb{P}^T D \mathbb{P}_z$. Отсюда $\mathbb{P}_z = -\mathbb{P}[\mathbb{P}^T D \mathbb{P}]^{-1} \mathbb{P}^T f'(x_{k,1})$. Окончательно, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k P_{2l} - \mathbb{P}[\mathbb{P}^T D \mathbb{P}]^{-1} \mathbb{P}^T f'(x_{k,1}) = x_k + \alpha_k P_{2l} - \mathbb{P}[\mathbb{P}^T D \mathbb{P}]^{-1} \mathbb{P}^T D(x_k + \alpha_k P_{2l})$, так как $f'(x) = Dx$. Заметим еще, что $P_{2l} = -(E - \mathbb{P}\mathbb{P}^T) f'(x_k) = \mathbb{P}\mathbb{P}^T D x_k - D x_k$ и что для шагов с достаточно большими номерами, в силу критерия сингулярности (см. §I), вторая производная функции f по направлению P_{2l} не больше S,

$$(x_k^T D \mathbb{P}\mathbb{P}^T - x_k^T D) D (\mathbb{P}\mathbb{P}^T D x_k - D x_k) \leq S \cdot (x_k^T D \mathbb{P}\mathbb{P}^T - x_k^T D)(\mathbb{P}\mathbb{P}^T D x_k - D x_k) \quad (3.I)$$

Для получения оценки скорости сходимости метода рассмотрим значение функции f в точке x_{k+1}:

$$x_{k+1}^T D x_{k+1} = [x_k^T + \alpha_k P_{2l}^T - (x_k^T + \alpha_k P_{2l}^T) D \mathbb{P}[\mathbb{P}^T D \mathbb{P}]^{-1} \mathbb{P}^T] D [x_k + \alpha_k P_{2l} - \mathbb{P}[\mathbb{P}^T D \mathbb{P}]^{-1} \mathbb{P}^T D (x_k + \alpha_k P_{2l})] = (x_k^T + \alpha_k P_{2l}^T) D (x_k + \alpha_k P_{2l}) -$$

$$-(x_k^T+\alpha_k P_{2l}^T)D\mathbb{P}[\mathbb{P}^T D\mathbb{P}]^{-1}\mathbb{P}^T D(x_k+\alpha_k P_{2l}) \qquad (*)$$

и оценим максимум выражения (*) при ограничении (3.I) и условии нормировки

$$x_k^T D x_k \le 1. \qquad (3.2)$$

Сделаем замену переменных $y_k=D^{1/2}x_k$ и обозначим $Q=D^{1/2}\mathbb{P}$. Тогда, очевидно, $D^{1/2}P_{2l}=-Dy_k+D^{1/2}\mathbb{P}\mathbb{P}^T D^{1/2}y_k=-Dy_k+QQ^Ty_k$, а выражение (*) перепишется в виде $(y_k^T+\alpha_k y_k^T QQ^T-\alpha_k y_k^T D)\cdot$
$\cdot(y_k+\alpha_k QQ^Ty_k-\alpha_k Dy_k)-(y_k^T+\alpha_k y_k^T QQ^T-\alpha_k y_k^T D)Q[Q^TQ]^{-1}\cdot$
$\cdot Q^T(y_k+\alpha_k QQ^Ty_k-\alpha_k Dy_k)=(y_k^T-\alpha_k y_k^T B)(E-Q[Q^TQ]^{-1}Q^T)\cdot$
$\cdot(y_k-\alpha_k By_k)$,
где матрица $B=D-QQ^T=D^{1/2}(E-\mathbb{P}\mathbb{P}^T)D^{1/2}$, E – единичная матрица. Так как $(E-Q[Q^TQ]^{-1}Q)$ – ортогональный проектор, то выражение (*) не превосходит по величине выражение

$$(y_k^T-\alpha_k y_k^T B)(y_k-\alpha_k By_k), \qquad (**)$$

максимум которого мы и будем искать при ограничениях (3.I) и (3.2). С учетом наших преобразований их можно переписать в следующем виде:

$$y_k^T B^2 y_k \le S\cdot y_k^T B y_k, \qquad (3.I')$$

$$y_k^T y_k \le 1. \qquad (3.2')$$

Заметим еще, что

$$\alpha_k=-\frac{x_k^T D P_{2l}}{P_{2l}^T D P_{2l}}=\frac{P_{2l}^T P_{2l}}{P_{2l}^T D P_{2l}}=\frac{y_k^T B y_k}{y_k^T B^2 y_k}.$$

Для решения этой задачи максимизации мы, не умаляя общности, предположим, что матрица B – диагональная,

$$B=\begin{pmatrix}\mu_1 & & & 0\\ & \mu_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mu_n\end{pmatrix},$$

причем, как видно из определения B, все μ_i лежат в отрезке $[m,M]$. Обозначая $y_k^T=(\eta_1,\eta_2,\dots,\eta_n)$ и подставляя в (**) выражение для α_k, мы получаем, что нужно найти максимум выражения

$$\sum_{j=1}^{n}\eta_j^2-\frac{\left(\sum_{j=1}^{n}\mu_j\eta_j^2\right)^2}{\sum_{j=1}^{n}\mu_j^2\eta_j^2} \qquad (***)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} \mu_j(\mu_j - S)\eta_j^2 \le 0, \qquad (3.1'')$$

$$\sum_{j=1}^{n} \eta_j^2 \le 1. \qquad (3.2'')$$

Совершенно очевидно, что на любом решении указанной задачи, в силу однородности (~~шиш~~) по η_j^2, ограничение (3.2″) должно выполняться как равенство, т.е. $\sum_{j=1}^{n} \eta_j^2 = 1$. Обозначив $\xi_j = \eta_j^2, j=\overline{1,n}$, мы получим задачу

$$F(\xi) = \frac{\left(\sum_{j=1}^{n} \mu_j \xi_j\right)^2}{\sum_{j=1}^{n} \mu_j^2 \xi_j} \longrightarrow \min \qquad (3.3)$$

при условиях

$$\sum_{j=1}^{n} \mu_j(\mu_j - S)\xi_j \le 0, \qquad (3.4)$$

$$\sum_{j=1}^{n} \xi_j = 1, \qquad (3.5)$$

$$\xi_j \ge 0, \quad j=\overline{1,n}. \qquad (3.6)$$

Решим сначала более широкую задачу минимизации целевой функции $F(\xi)$ на симплексе, определяемом условиями (3.5)-(3.6). Как легко убедиться, дифференцируя и приравнивая к нулю частные производные функции Лагранжа для этой задачи, минимум целевой функции $F(\xi)$ не может достигаться внутри граней симплекса, размерность которых больше единицы. На одномерных же гранях симплекса, т.е. множествах $\Gamma_{ij} = \{(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) / \xi_k = 0, k \ne i, k \ne j, \sum_{t=1}^{n} \xi_t = 1; \xi_t \ge 0, t=\overline{1,n}\}$, минимум $F(\xi)$ находится в точках $\xi_i = \frac{\mu_j}{\mu_i + \mu_j}$, $\xi_j = \frac{\mu_i}{\mu_i + \mu_j}$, $\xi_k = 0, \ k \ne i, \ k \ne j$, и равен $\frac{4\mu_i\mu_j}{(\mu_i + \mu_j)^2}$, где μ_i и μ_j – соответствующие различные собственные числа матрицы B. Исследование вещественной функции $G(x,y) = \frac{4xy}{(x+y)^2}$ на квадрате $[m,M] \times [m,M]$ показывает, что наименьшим из этих чисел является значение $\frac{4mM}{(m+M)^2}$, соответствующее наименьшему и наибольшему собственным значениям матрицы B (или матрицы D). Далее условие (3.4) "отрезает" некоторую часть симплекса (3.5)-(3.6), и поэтому ясно, что минимум $F(\xi)$ может разве что возрасти по сравнению с только что найденным значением. В допустимой части симплекса некоторые одномерные грани вообще отсутствуют, а некоторые "разрезаны" гиперплоскостью

$$\sum_{j=1}^{n} \mu_j(\mu_j - S)\xi_j = 0.$$

Снова дифференцированием соответствующих функций Лагранжа показывается, что ни на одной грани допустимого множества, размерность которой больше единицы, минимум целевой функции $F(\xi)$ достигаться не может, а на одномерных гранях дело обстоит следующим образом.

а) Если на одномерной грани симплекса (3.5)-(3.6), соответствующей паре собственных значений μ_i, μ_j, точка $\xi_i = \frac{\mu_j}{\mu_i+\mu_j}$, $\xi_j = \frac{\mu_i}{\mu_i+\mu_j}$, $\xi_k = 0$, $k \neq i$, $k \neq j$, допустима, то минимальное значение функции $F(\xi)$ на этой грани достигается в ней и равно $\frac{4\mu_i\mu_j}{(\mu_i+\mu_j)^2}$, в противном случае точкой минимума является точка пересечения данной грани с гиперплоскостью $\sum_{t=1}^{n} \mu_t(\mu_t - S)\xi_t = 0$, а минимальным значением $F(\xi)$ будет число $\frac{\mu_i\mu_j}{S(\mu_i+\mu_j-S)}$.

б) На одномерных гранях допустимого множества, образованных пересечением гиперплоскости $\sum_{t=1}^{n} \mu_t(\mu_t - S)\xi_t = 0$ с двумерными гранями исходного симплекса, минимум целевой функции $F(\xi)$ может достигаться лишь на концах этих одномерных граней, т.е. в точках их пересечения с одномерными гранями исходного симплекса.

Так как условием допустимости точки $\xi_i = \frac{\mu_j}{\mu_i+\mu_j}$, $\xi_j = \frac{\mu_i}{\mu_i+\mu_j}$, $\xi_k = 0$, $k \neq i$, $k \neq j$, является выполнение неравенства $S \geq \frac{\mu_i+\mu_j}{2}$, то дальнейшее рассмотрение разбивается на следующие этапы.

СЛУЧАЙ I. Пусть $S \geq \frac{M+m}{2}$. Минимальным значением $F(\xi)$ в нашей задаче будет $\frac{4mM}{(m+M)^2}$.

СЛУЧАЙ 2. $m \leq S < \frac{m+m_1}{2}$, где m_1 – первое после m собственное число, большее m. Очевидно, минимальные значения $F(\xi)$ на одномерных гранях допустимого множества равны $\frac{\mu_i\mu_j}{S(\mu_i+\mu_j-S)}$, а наименьшим из этих чисел является, как легко установить, значение $\frac{mM}{S(m+M-S)}$.

СЛУЧАЙ 3. По мере возрастания параметра S от $\frac{m+m_1}{2}$ до $\frac{m+M}{2}$ происходит следующее: на тех одномерных гранях, для которых либо $S > \mu_k > \mu_\ell$, либо $\mu_k \geq S > \mu_\ell$ и $S \geq \frac{\mu_\ell+\mu_k}{2}$, минимальное значение $F(\xi)$ равно $\frac{4\mu_k\mu_\ell}{(\mu_k+\mu_\ell)^2}$, а в случае $\mu_\ell \leq S <$

$< \frac{\mu_l+\mu_k}{2}$ наименьшим значением $F(S)$ на этой грани является число $\frac{\mu_l \mu_k}{S(\mu_l+\mu_k-S)}$. (Когда $S<\mu_l<\mu_k$, то соответствующая грань вообще не допустима.) Далее легко проверить, что неравенство $\frac{4\mu_l\mu_k}{(\mu_l+\mu_k)^2} < \frac{\mu_l M}{S(\mu_l+M-S)}$ выполняется только для тех S, при которых либо минимальным на всем допустимом множестве значением целевой функции $F(S)$ является число $\frac{4mM}{(m+M)^2}$, либо на соответствующей грани достигается не значение $\frac{4\mu_l\mu_k}{(\mu_l+\mu_k)^2}$, а значение $\frac{\mu_l\mu_k}{S(\mu_l+\mu_k-S)}$. А последнее, как легко проверить, больше $\frac{\mu_l M}{S(\mu_l+M-S)}$, которое, в свою очередь, не меньше $\frac{mM}{S(m+M-S)}$, а это значение всегда достигается при $m \le S < \frac{m+M}{2}$.

Итак, мы показали, что максимальное значение $x_{k+1}^T D x_{k+1}$ при ограничениях (3.I)–(3.2) не превосходит $q_1^2 = 1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$ при $M \geqslant S \geqslant \frac{M+m}{2}$ и не превосходит $q_2^2 = 1 - \frac{mM}{S(m+M-S)} = \frac{(M-S)(S-m)}{S(m+M-S)}$ при $m \le S < \frac{m+M}{2}$. Отсюда $f(x_{k+1}) \le q_i^2 f(x_k) \le \ldots \le q_i^{2(k+1)} f(x_0)$, где $i=1$ или $i=2$. Следовательно, $m|x_{k+1}-x_*|^2 \le (f''_{cp}(x_{k+1}-x_*), x_{k+1}-x_*) = 2[f(x_{k+1})-f(x_*)] \le 2q_i^{2(k+1)}[f(x_0)-f(x_*)] \le q_i^{2(k+1)} \cdot M \cdot |x_0-x_*|^2$. Поэтому $|x_{k+1}-x_*| \le q_i^{k+1} \cdot \sqrt{\frac{M}{m}}\, |x_0-x_*|$, где $q_1 = \frac{M-m}{M+m}$ в случае $M \geqslant S \geqslant \frac{M+m}{2}$, $q_2 = \sqrt{\frac{(M-S)(S-m)}{S(m+M-S)}}$ в случае $m \le S < \frac{m+M}{2}$. Тем самым доказана линейная скорость сходимости метода в применении к квадратичной целевой функции. Ясно, что чем меньше S, тем быстрее сходится метод, но при этом возрастает трудоемкость, так как ужесточается тест на сингулярность и, следовательно, может выделяться больше сингулярных направлений. Однако следует заметить, что в случае иерархической овражности, на которую рассчитан метод, т.е. если $M \gg \mu_2 \gg \mu_3 \gg \ldots \geqslant m$, то выбрав $S \sim \frac{\mu_3+m}{2}$, мы получим достаточно хорошую скорость сходимости по сравнению с градиентным методом, так как $S \ll \frac{M+m}{2}$. В то же время мы не будем выделять слишком много сингулярных направлений, так как S достаточно велико по сравнению с небольшими собственными значениями.

§4. Реализация метода и численные эксперименты

Описанный в §I метод был реализован в виде программы на языке АЛГОЛ-60 (транслятор ТА-IМ), и на ЭВМ М-222 были проделаны испытания метода на некоторых тестовых функциях.

Несколько уточнений к реализации алгоритма.

I. В качестве q брались константы 0,4 и 0,7, $\varepsilon = 0{,}001$. Критерий восстановления нулевой матрицы сингулярных направлений P_ℓ (аннулирования сингулярных направлений при переходе к следующему шагу) состоял в следующем. На $(k+1)$-м шаге мы рассматриваем отношение $\theta = \frac{f(x_k)-f(x_{k+1})}{f(x_{k-1})-f(x_k)}$ и сравниваем его с параметром τ. Если $\theta > \tau$, то сингулярные направления сохраняются, а параметру τ придается значение θ. Если выполняется неравенство $\tau \geq \theta \geq \tau/2$, то снова сингулярные направления сохраняются, но τ не изменяется. Если же $\theta < \frac{\tau}{2}$, то сингулярные направления $(k+1)$-го шага аннулируются и их накопление начинается заново на $(k+2)$-м шаге, а τ придается значение I.

2. Во избежание переполнения разрядной сетки машины первоначальная длина шага α_0 в п.6, §I (описание метода) выбиралась равной $\alpha_0 = \min\left\{0.6, \frac{1+|f(x_k)|}{\|f'(x_k)\|^2}\right\}$.

3. Поиск точки $x_{k+1} = x_{k,1} + \beta_k z_\ell$ на сингулярном шаге (п.5, §I), где β_k дает решение задачи $\min\limits_{\beta \in R} f(x_{k,1} + \beta z_\ell)$, осуществлялся методом золотого сечения [I5].

Были просчитаны задачи со следующими целевыми функциями.

ПРИМЕР I. $f(x) = 10^3 x_1^2 + 10^2 x_2^2 + 10 x_3^2 + x_4^2$. Начальное приближение x_0=(I,I,I,I). Точка минимума x_*=(0,0,0,0). Точность ε = 0,00I по градиенту достигнута за 26 шагов. На каждом шаге выделялось I-2 сингулярных направления.

ПРИМЕР 2 [7]. $f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$. Начальное приближение x_0=(I0,I0,I0,-I0). Точка минимума x_* =(0,0,0,0). Точность ε=0,00I по градиенту достигнута за 35 шагов. В среднем на каждом шаге выделялось 2 сингулярных направления.

ПРИМЕР 3 [I6]. $f(x) = (e^{x_1} - x_2)^4 + 100(x_2 - x_3)^6 + th^4(x_3 - x_4) + x_1^8 (x_4 - 1)^2$. Начальное приближение x_0=(I,2,2,2). Точка минимума x_*= =(0,I,I,I). Точность ε=0,00I по градиенту достигнута за I2 шагов. На каждом шаге выделялось I-2 сингулярных направления.

ПРИМЕР 4 [7]. $f(x) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2 + 90(x_3^2 - x_4)^2 + (x_3 - 1)^2 + 10.1[(x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2] + 19.8(x_2 - 1)(x_4 - 1)$. Начальное приближение x_0 =(-3,-I,-3,-I). Точка минимума x_*=(I,I,I,I). Точность ε = =0,00I по градиенту достигнута за I00 шагов.

ПРИМЕР 5[2]. $f(x) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2$. Начальное приближение x_0=(-I,2; I,0). Точка минимума x_* =(I,0; I,0). Точность ε =0,00I по градиенту достигнута за 59 шагов.

В заключение автор приносит глубокую благодарность В.А.Булавскому за постановку задачи и постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

I. ШОР Н.З. Использование операций растяжения пространства в задачах минимизации выпуклых функций. - Кибернетика, 1970, № I, с.6-12.

2. POWELL M.J.D. A new algorithm for unconstrained optimizatoon.- In: Nonlinear programming. - N.Y: Academic Press, 1970, p. 31-66.

3. OREN S.S., LUENBERGER D.G. Self-scaling variable metric (SSVM) algorithms.Part I. - Management Sci., 1974, N5,p. 845-862.

4. OREN S.S. Self-scaling variable metric algorithms. Part II.- Management Sci., 1974, N5, p.863-879.

5. DAVIDON W.C. Optimally conditioned optimization algorithms without linear searches. - Math. Programming, 1975, N9, p. 1-30.

6. DENNIS J.E., MEI H.H.W. An unconstrained optimization algorithm which uses function and gradient values. - Comp. Sci. Tech. Rep., TR75-246, Cornell Univercity, Ithaca, N.Y., 1975.

7. BOGGS P.T. An algorithm, based on singular perturbation theory, for ill-conditioned minimization problems. - SIAM J. Numer. Analysis, 1977, v. 14, N5, p. 830-843.

8. MIRANKER W.L. Numerical method of boundary layer type for stiff systems of differential equations.- Computing, 1973, n.11.

9. ТИХОНОВ А.Н. Системы дифференциальных уравнений, содержащие малый параметр при высшей производной. - Мат. сб., 1952, 73(31), с.575-585.

10. ПОНТРЯГИН Л.С. Асимптотическое поведение решений систем дифференциальных уравнений с малым параметром при высших производных. - Изв. АН СССР, 1957, № 21. Сер. математика, с.605-626.

11. ВИШИК М.И., ЛЮСТЕРНИК Л.А. Регулярное вырождение и пограничный слой для линейных дифференциальных уравнений с малым параметром. - Успехи мат. наук, 1957, т.12, № 5, с.3-122.

12. ВАСИЛЬЕВА А.Б. Асимптотические формулы для решения систем дифференциальных уравнений, содержащих параметры различных

порядков малости. - ДАН СССР, 1959, т.128, с.1110-1113.

13. ВАСИЛЬЕВА А.Б. Асимптотические методы в теории обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащих малые параметры перед высшими производными. - Журн. вычислит. математики и мат. физики, 1963, т.3, № 4, с.611-642.

14. ВАСИЛЬЕВА А.Б., БУТУЗОВ В.Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. - М.: Наука, 1973.

15. КАРМАНОВ В.Г. Математическое программирование. М.: Наука, 1975.

16. ШОР Н.З., ЖУРБЕНКО Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов. - Кибернетика, 1971, № 3, с. 51-59.

Поступила в ред.-изд. отдел
26.05.1980 г.