Журнал обчислювальної та прикладної математики — **2021, № 2 (136)** — Journal of Numerical & Applied Mathematics

УДК 519.85

MSC 90C53, 90C25, 49J52

B-FORM OF THE DAVIDON–FLETCHER–POWELL METHOD

P. Stetsyuk, V. Stovba, A. Suprun

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics, the National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine, E-mail: {stetsyukp, vik.stovba}@gmail.com, anton_s2007@ukr.net

B-ФОРМА МЕТОДА ДАВИДОНА–ФЛЕТЧЕРА–ПАУЭЛЛА

П. Стецюк, В. Стовба, А. Супрун

Институт кибернетики имени В.М. Глушкова, Национальная академия наук Украины, Киев, Украина, E-mail: {stetsyuk, vik.stovba}@gmail.com, anton_s2007@ukr.net

Abstract. A special form (B-form) of methods of Quasi-Newton type is discussed, which makes it easy to interpret these methods as gradient in appropriately transformed argument space. B-form of the Davidon–Fletcher–Powell method is given and compared with r-algorithms. To minimize smooth convex functions, a gradient method with space transformation is built, combining properties of both quasi-Newtonian methods and r-algorithms. Possible schemes of this type of methods for minimizing non-smooth convex functions are discussed.
Keywords: quasi-Newtonian methods, DFP-method, space transformation, gradient method, r-algorithm.

Аннотация. Обсуждается специальная форма (B-форма) методов квазиньютоновского типа, которая позволяет легко интерпретировать эти методы, как градиентные в преобразованном соответствующим образом пространстве аргументов. Приведена B-форма метода Давидона–Флетчера–Пауэлла и на ее основе проведено сравнение этого метода с r-алгоритмами. Для минимизации гладких выпуклых функций построен градиентный метод с преобразованием пространства, сочетающий свойства как квазиньютоновских методов, так и r-алгоритмов. Обсуждаются возможные схемы такого типа методов для минимизации негладких выпуклых функций.
Ключевые слова: квазиньютоновские методы, ДФП-метод, преобразование пространства, градиентный метод, r-алгоритм.

Введение

Теория квазиньютоновских методов [1–6] опирается на возможность аппроксимации кривизны нелинейной функции без явного формирования ее матрицы Гессе, т.е. данные о матрице Гессе накапливаются в них на основе наблюдения за изменением градиента функции во время итераций спуска по направлению. Они требуют на итерации существенно меньшего объема вычислений, чем ньютоновские методы, и при определенных условиях способны обеспечить скорость сходимости, характерную для методов второго порядка.

Первый метод квазиньютоновского типа, который условимся называть ДФП-методом, предложен Давидоном в [7] и развитый Флетчером и Пауэллом в [8]. ДФП-метод является одним из эффективных среди методов квазиньютоновского типа. Его превосходит только метод Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно, вариант которого известный как L-BFGS [9] активно используется в машинном обучении и обработке больших объемов данных.

Семейство методов квазиньютовского типа можно расширить, используя методики из [3] и [4], суть которой состоит в выборе поправок с помощью матриц первого или второго ранга для коррекции симметричной матрицы, используемой на очередном шаге метода. Однако анализ некоторых квазиньютоновских методов можно упростить, если от шага к шагу использовать одноранговую коррекцию несимметричной матрицы [10].

Другими словами, имеются две возможности представления одного и того же квазиньютоновского метода. Будем придерживаться для них тех названий, которые закрепились за подобными схемами методов субградиентного типа с растяжением пространства [11]. Методы, где корректируется матрица B — матрица обратного преобразования пространства (она может быть несимметричной), будем называть методами в B-форме, а методы, использующие коррекцию симметричной матрицы BB^T, — методами в H-форме. Каждая из этих форм имеет как преимущества, так и недостатки. Сочетание обеих форм позволяет проводить более основательный анализ методов квазиньютоновского типа.

В статье рассматривается B-форма ДФП-метода, которая позволяет интерпретировать его как градиентный метод в преобразованном соответствующим образом пространстве аргументов. Материал статьи изложен в следующем порядке. В первом разделе рассматриваются H и B-формы квазиньютоновских методов, во втором разделе эти формы приводятся для ДФП-метода. Третий раздел посвящен обсуждению сходства ДФП-метода и r-алгоритмов. В четвертом разделе построен DFPR(α)-алгоритм, который является в некотором смысле промежуточным между ДФП-методом и $r_\mu(\alpha)$-алгоритмом [11]. В пятом разделе обсуждается перенос основных принципов DFPR(α)-алгоритма на общий случай задачи минимизации выпуклой функции.

1. H и B-формы квазиньютоновских методов

Пусть имеется задача

$$\min f(x), \tag{1}$$

где $f(x)$ — выпуклая дважды дифференцируемая функция векторного аргумента $x \in X$, $X = \mathbb{R}^n$, $\mathbb{R}^n$ — евклидово пространство размерностью n со скалярным произведением (x, y), x^* — экстремальная точка задачи (1).

Пусть начальная точка x_0 выбрана в достаточно малой окрестности точки минимума x^*, т. е. $f(x)$ будет хорошо аппроксимироваться квадратичной функцией

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}\Big(\nabla^2 f(x^*)\,(x - x^*),\ x - x^*\Big) + f(x^*).$$

Здесь $\nabla^2 f(x^*)$ — матрица Гессе в точке минимума. Пусть H_0 — симметричная положительно определенная матрица размером $n \times n$. Обычно полагают $H_0 = I$, где I — единичная матрица.

Методы квазиньютоновского типа в H-форме генерируют последовательность точек $\{x_k, \quad k = 0, 1, \ldots, n\}$ по следующему правилу:

$$x_{k+1} = x_k - h_k\, H_k \nabla f(x_k), \tag{2}$$

где $\nabla f(x_k)$ — градиент $f(x)$ в точке x_k; H_k — симметричная матрица размером $n \times n$; h_k — шаг, соответствующий минимуму $f(x)$ в направлении $-H_k \nabla f(x_k)$, т. е.

$$h_k = \operatorname{argmin}_{h \geq 0} \Big\{ f\Big(x_k - h H_k \nabla f(x_k)\Big)\Big\}. \tag{3}$$

Пересчет матрицы H от шага к шагу осуществляется следующим образом:

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k, \tag{4}$$

где ΔH_k — матрица небольшого ранга, построенная на основе поведения градиентов $\nabla f(x_k)$ и $\nabla f(x_{k+1})$ так, чтобы $H_n \approx \Big[\nabla^2 f(x^*)\Big]^{-1}$. Возможность такого пересчета обеспечивает так называемое квазиньютоновское условие

$$H_{k+1}\Big(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)\Big) = -h_k\, H_k \nabla f(x_k). \tag{5}$$

Для квазиньютоновских методов, в которых отброшено условие окончания процесса за n шагов при минимизации квадратичных функций, условие (5) обеспечивает выполнение свойства, состоящего в том, что собственные числа матрицы H_k стремятся к собственным числам матрицы $\Big[\nabla^2 f(x^*)\Big]^{-1}$. Фактически разница между методами квазиньютоновского типа в H-форме состоит в различных формулах пересчета матрицы H_{k+1}, удовлетворяющих квазиньютоновскому условию (5) и одному из указанных выше способов приближения H_k к $\Big[\nabla^2 f(x^*)\Big]^{-1}$.

Положительно определенную симметричную матрицу H_k всегда можно представить в виде $H_k = B_k B_k^T$, где B_k — невырожденная матрица размером $n \times n$. Соотношение (2), реализующее переход в очередную точку для H-формы квазиньютоновских методов, можно записать так:

$$x_{k+1} = x_k - h_k\, B_k B_k^T \nabla f(x_k) \tag{6}$$

или же

$$y_{k+1} = y_k - h_k\, B_k^T \nabla f(x_k) = y_k - h_k \nabla \varphi_k(y_k), \tag{7}$$

где $y_{k+1} = B_k^{-1} x_{k+1}$ и $y_k = B_k^{-1} x_k$ — образы точек x_{k+1} и x_k из X в преобразованном посредством линейного оператора $A_k = B_k^{-1}$ пространстве аргументов. $\nabla\varphi_k(y_k) = B_k^T \nabla f(x_k)$ — градиент функции $\varphi_k(y) = f(B_k y)$, определенной в пространстве аргументов $Y_k = A_k X$, в точке y_k.

Процесс (7) можно интерпретировать как градиентный метод наискорейшего спуска в преобразованном пространстве аргументов $Y_k = A_k X$ для минимизации выпуклой гладкой функции $\varphi_k(y) = f(B_k y)$. Соотношение (3), определяющее выбор шагового множителя в квазиньютоновских методах, равносильно следующему:

$$h_k = \operatorname{argmin}_{h \geq 0} \Big\{ \varphi_k \Big(y_k - h\, B_k^T \nabla f(x_k) \Big) \Big\} = \\ = \operatorname{argmin}_{h \geq 0} \Big\{ \varphi_k \Big(y_k - h \nabla \varphi_k(y_k) \Big) \Big\}, \quad (8)$$

где $\varphi_k(y) = f(B_k y)$ — функция, определенная в Y_k.

Соотношения (6)–(8) в сочетании с процедурой малоранговой коррекции матрицы B_k позволяют описывать квазиньютоновские методы в B-форме. При этом такие методы имеют достаточно простую градиентную природу в преобразованном пространстве аргументов. Заметим, что в силу неоднозначности разложения $H_k = B_k B_k^T$ для конкретного метода в H-форме следует существование разных методов в B-форме. Но это не так уж плохо, так как при построении B-метода легко учитывать и то обстоятельство, которое обеспечивает численную устойчивость метода. Например, при одноранговой коррекции матрицы $B_{k+1} = B_k T_k$ матрицу T_k выбираем так, чтобы отношение $\lambda_{max}(T_k) \;/\; \lambda_{min}(T_k)$ было по возможности меньшим. Здесь $\lambda_{max}(T_k)$ $\big(\lambda_{min}(T_k)\big)$ — максимальное (минимальное) собственное число матрицы T_k.

Однако численная устойчивость B-формы методов уступает двум преимуществам H-формы: более экономному хранению матрицы и возможности обойтись меньшим числом арифметических операций на итерации. Поэтому здесь нужен некий компромисс между исследованием и анализом методов и их реализацией на ЭВМ. В качестве такового может служить, например, разработка численно устойчивого метода квазиньютоновского типа в B-форме, а уже как следствие рассматривать H-форму этого метода с целью экономии памяти и вычислений. Тем более что разработке такого метода ничего не мешает. На самом деле, квазиньютоновское условие можно записать так:

$$B_{k+1} B_{k+1}^T \Big(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) \Big) = -h_k\, B_k B_k^T \nabla f(x_k).$$

Обозначим $\xi = B_k^T \nabla f(x_{k+1}) - B_k^T \nabla f(x_k)$ и $\eta = B_k^T \nabla f(x_k)$ — соответственно векторы разности последовательных градиентов и текущего градиента в преобразованном пространстве аргументов. Пусть для пересчета B_{k+1} используется одноранговая коррекция достаточно общего вида:

$$B_{k+1} = B_k \left(I + t_1 \,(\xi + t_2\, \eta)\, (\xi + t_3\, \eta)^T \right),$$

где t_1, t_2, t_3 — неизвестные скалярные параметры. Тогда, для того чтобы выполнить квазиньютоновское условие, параметры t_1, t_2, t_3 должны удовлетворять следующему соотношению:

$$\Big(I + t_1(\xi + t_2\,\eta)\,(\xi + t_3\,\eta)^T\Big)\Big(I + t_1(\xi + t_3\,\eta)\;(\xi + t_2\,\eta)^T\Big)\xi = -h_k\,\eta, \qquad (9)$$

связывающему векторы ξ и η в преобразованном пространстве аргументов.

Из соотношения (9) следуют два уравнения для трех неизвестных параметров t_1, t_2 и t_3. Выбор некоторых из них дает уже известные методы квазиньютоновского типа. Так, например, положив $t_3 = 0$ и тогда, однозначно определив t_1 и t_2, получим ДФП-метод. Но выбор этих параметров порождает и ряд новых методов квазиньютоновского типа, которые используют одноранговую коррекцию матрицы B_k, и вполне возможно, что среди этих методов можно отыскать и такие, которые по эффективности не будут уступать методу Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно.

2. H и B-формы ДФП-метода

Обе формы ДФП-метода для задачи (1) опишем в предположении, что x_0 — начальное приближение из достаточно малой окрестности точки минимума x^*. H-форму ДФП-метода приведем согласно [1] с точностью до незначительных переобозначений.

H-форма ДФП-метода

Шаг 0. Выбрать $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Если $\nabla f(x_0) = 0$, то остановиться, положив $x^* = x_0$. Иначе положить $H_0 = I$, где I — единичная матрица размером $n \times n$, $g_0 = \nabla f(x_0)$, $k = 0$ и перейти к шагу 1.

Шаг 1. Положить

$$\xi_k = H_k\,g_k. \qquad (10)$$

Шаг 2. Вычислить

$$h_k = \operatorname{argmin}_{h \geq 0}\left\{f\Big(x_k - h\xi_k\Big)\right\}. \qquad (11)$$

Шаг 3. Положить

$$x_{k+1} = x_k - h_k\,\xi_k. \qquad (12)$$

Шаг 4. Если $\nabla f(x_{k+1}) = 0$, то остановиться, положив $x^* = x_{k+1}$. Иначе положить

$$g_{k+1} = \nabla f\left(x_{k+1}\right), \quad \Delta g_k = g_{k+1} - g_k, \quad \Delta x_k = x_{k+1} - x_k, \qquad (13)$$

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k \Delta g_k (\Delta g_k)^T H_k}{(\Delta g_k,\ H_k \Delta g_k)} = \frac{\Delta x_k (\Delta x_k)^T}{(\Delta g_k,\ \Delta x_k)}. \qquad (14)$$

Шаг 5. Положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 1.

Для описания B-формы ДФП-метода нам понадобятся некоторые вспомогательные результаты. Так, используя (12) и (13), пересчет матрицы

H_{k+1}, согласно (14), можно записать следующим образом:

$$
\begin{aligned}
H_{k+1} &= H_k - \frac{H_k \Delta g_k (\Delta g_k)^T H_k}{(\Delta g_k,\ H_k \Delta g_k)} + h_k \frac{H_k g_k\, g_k^T H_k}{(\Delta g_k,\ H_k g_k)} = \\
&= B_k B_k^T - \frac{B_k B_k^T \Delta g_k (\Delta g_k)^T B_k B_k^T}{(\Delta g_k,\ B_k B_k^T \Delta g_k)} + h_k \frac{B_k B_k^T g_k\, g_k^T B_k B_k^T}{(\Delta g_k,\ B_k B_k^T g_k)} \\
&= B_k \Big(I - \xi_k\, \xi_k^T + t_k^2 \eta_k\, \eta_k^T \Big) B_k^T = B_{k+1} B_{k+1}^T,
\end{aligned} \tag{15}
$$

где

$$
\xi_k = \frac{B_k^T g_{k+1} - B_k^T g_k}{\|B_k^T g_{k+1} - B_k^T g_k\|}, \quad \eta_k = \frac{B_k^T g_k}{\|B_k^T g_k\|}
$$

и

$$
t_k^2 = h_k \frac{\|B_k^T g_k\|^2}{\Big(B_k^T g_k,\ B_k^T g_k - B_k^T g_{k+1} \Big)}.
$$

Положительность параметра t_k^2 обеспечивается выбором h_k из условия наискорейшего спуска для гладкой функции в преобразованном пространстве аргументов. При точной реализации наискорейшего спуска $t_k^2 = h_k$, так как $(B_k^T g_k,\ B_k^T g_{k+1}) = 0$. Для того чтобы обеспечить пересчет матрицы H_{k+1} как в (15), достаточно корректировать $B_{k+1} = B_k T_k$, где $T_k = \Big(I - \big(\xi_k + t_k\, \eta_k\big)\, \xi_k^T \Big)$. На самом деле, при такой коррекции B_{k+1} для $T_k T_k^T$ имеем:

$$
\begin{aligned}
T_k T_k^T &= \Big(I - \big(\xi_k + t_k \eta_k\big) \xi_k^T \Big) \Big(I - \xi_k \big(\xi_k + t_k \eta_k\big)^T \Big) = \\
&= I - \big(\xi_k + t_k \eta_k\big) \xi_k^T - \xi_k \big(\xi_k + t_k \eta_k\big)^T + \big(\xi_k + t_k \eta_k\big) \big(\xi_k + t_k \eta_k\big)^T = \\
&= I - \xi_k\, \xi_k^T + t_k^2 \eta_k\, \eta_k^T,
\end{aligned}
$$

что обеспечивает средний множитель в правой части (15).

Следовательно, для одноранговой коррекции матрицы B_{k+1} подходит следующая формула:

$$
\begin{aligned}
B_{k+1} = B_k \ & \left(I - \left(\frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|} + \sqrt{h_k \frac{\|\widetilde{g}_k\|^2}{(\widetilde{g}_k, \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}} \frac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|} \right) \times \right. \\
& \left. \times \left(\frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|} \right)^T \right),
\end{aligned} \tag{16}
$$

где $\widetilde{g}_{k+1}$ и $\widetilde{g}_k$ — субградиенты функции $\varphi_k(y) = f(B_k y)$ в точках $y_{k+1} = B_k^{-1} x_{x+1}$ и $y_k = B_k^{-1} x_k$ соответственно. С учетом (16), B-форма ДФП-метода приобретает следующий вид.

B-форма ДФП-метода

Шаг 0. Выбрать $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Если $\nabla f(x_0) = 0$, то остановиться, положив $x^* = x_0$. Иначе положить $B_0 = I$, где I — единичная матрица размером $n \times n$, $g_0 = \nabla f(x_0)$, $k = 0$ и перейти к шагу 1.

Шаг 1. Положить

$$\widetilde{g}_k = B_k^T g_k. \tag{17}$$

Шаг 2. Положить

$$\xi_k = B_k \widetilde{g}_k. \tag{18}$$

Шаг 3. Вычислить

$$h_k = \mathrm{argmin}_{h \geq 0} \Big\{ f(x_k - h\xi_k) \Big\}. \tag{19}$$

Шаг 4. Положить

$$x_{k+1} = x_k - h_k\, \eta_k. \tag{20}$$

Шаг 5. Если $\nabla f(x_{k+1}) = 0$, то остановиться, положив $x^* = x_{k+1}$. Иначе положить $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}), \quad \widetilde{g}_{k+1} = B_k^T g_{k+1}$,

$$\xi_k = \frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|} + \sqrt{h_k \frac{\|\widetilde{g}_k\|^2}{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}}\ \frac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|}, \quad \eta_k = \frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|}, \tag{21}$$

$$B_{k+1} = B_k \left(I - \xi_k \eta_k^T \right). \tag{22}$$

Шаг 6. Положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 1.

Приведенный ДФП-метод в B-форме (17)–(22) не является оптимальным по использованию арифметических операций. Его можно улучшить, убрав операцию умножения матрицы на вектор в (17) за счет того, что

$$B_{k+1}^T g_{k+1} = \Big(I - \eta_k\, \xi_k^T \Big) B_k^T g_{k+1} = \widetilde{g}_{k+1} - \eta_k (\xi_k,\ \widetilde{g}_{k+1}).$$

Но даже в этом случае он будет уступать ДФП-методу в H-форме (10)–(14) по количеству арифметических операций, хотя этот разрыв будет не таким уж и большим ($4n^2$ умножений по отношению к $3n^2$ умножений).

Тем не менее B-форма позволяет прояснить ряд моментов для ДФП-метода. Во-первых, положительная определенность матрицы

$$H_{k+1} = B_{k+1} B_{k+1}^T$$

является следствием невырожденности матрицы B_{k+1}, если матрица B_k — невырождена. На самом деле, определитель матрицы B_{k+1} будет таким:

$$\det(B_{k+1}) = \det\Bigg(B_k \Big(I - \xi_k \eta_k^T \Big) \Bigg) = \det(B_k) \Bigg(1 - \Big(\xi_k,\ \eta_k \Big) \Bigg) =$$

$$= \det(B_k)\Bigg(1 - \bigg(\frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|} + \\ + \sqrt{h_k\ \frac{\|\widetilde{g}_k\|^2}{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}}\ \frac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|},\ \frac{\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|}\bigg)\Bigg) =$$

$$= \det(B_k)\sqrt{h_k\ \frac{\|\widetilde{g}_k\|^2}{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}}\ \frac{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\| \cdot \|\widetilde{g}_k\|} =$$

$$= \det(B_k)\sqrt{h_k\ \frac{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_k - \widetilde{g}_{k+1})}{\|\widetilde{g}_{k+1} - \widetilde{g}_k\|^2}} \neq 0.$$

При точном наискорейшем спуске

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k)\sqrt{h_k\ \frac{\|\widetilde{g}_k\|^2}{\|\widetilde{g}_k\|^2 + \|\widetilde{g}_{k+1}\|^2}}$$

и он равен нулю тогда, когда либо $h_k = 0$, либо $\|\widetilde{g}_k\| = 0$, что для гладких выпуклых функций обозначает выполнение достаточного условия оптимальности в преобразованном пространстве аргументов.

Во-вторых, параметр $\Delta_k = \dfrac{(\widetilde{g}_k,\ \widetilde{g}_{k+1})}{\|\widetilde{g}_k\|^2} = \dfrac{(g_k,\ H_k g_{k+1})}{(g_k,\ H_k g_k)}$, который следует из (21) при $\dfrac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|}$, задает точность выполнения условия наискорейшего спуска в преобразованном пространстве аргументов. Его или близкое к нему условие естественно использовать в квазиньютоновских методах с приближенным вычислением минимума функции по направлению в качестве критерия останова при одномерном спуске по направлению.

В-третьих, Δ_k в сочетании с шагом наискорейшего спуска h_k разумно использовать для процедуры рестарта методов квазиньютоновского типа, учитывая, что в процессе пересчета матрицы B_{k+1} возможно накопление ошибок. Именно эти параметры и в большей мере шаг наискорейшего спуска h_k сказываются на точности пересчета матрицы B_{k+1}.

3. ДФП-метод и r-алгоритмы

Для r-алгоритмов [11–13] отмечена их «близость» к ДФП-методу в смысле формул пересчета матрицы H_{k+1}. Используя B-форму ДФП-метода, можно проинтерпретировать эту «близость»более содержательно посредством анализа, происходящего в преобразованном пространстве аргументов. Сделаем это для ДФП-метода (17)–(22) и тех вариантов r-алгоритмов, которые используют точный поиск минимума функции по направлению — $r_\mu(\alpha)$-алгоритм ($\alpha \in [2, 4]$) и предельный вариант r-алгоритма ($\alpha = \infty$) [11]. В качестве характеристики для сравнения выберем изменение угла между двумя последовательными субградиентами, которое характерно для одной итерации этих методов при переходе из Y_k в Y_{k+1}. Естественно, эти сравнения справедливы только для гладких функций.

Пусть g_k и g_{k+1} — субградиенты $\varphi_k(y) = f(B_k y)$, определенной в преобразованном пространстве аргументов $Y_k = B_k^{-1} X$, которые получены согласно точному шагу наискорейшего спуска h_k^* в пространстве аргументов Y_k. Тогда их образы $\widetilde{g}_k$ и $\widetilde{g}_{k+1}$ в преобразованном пространстве $Y_{k+1} = B_{k+1}^{-1} X$, учитывая, что $\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = 0$, будут

$$\begin{aligned}
\widetilde{g}_k &= \left(I - \frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|}\left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} + \sqrt{h_k^*}\,\frac{g_k}{\|g_k\|}\right)^T\right) g_k = \\
&= g_k + \left(\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} - \sqrt{h_k^*\,\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2}}\right)(g_{k+1} - g_k) = \\
&= \left(\frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} + \sqrt{h_k^*\,\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2}}\right) g_k + \\
&+ \left(\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} - \sqrt{h_k^*\,\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2}}\right) g_{k+1},
\end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}
\widetilde{g}_{k+1} &= \left(I - \frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|}\left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} + \sqrt{h_k^*}\,\frac{g_k}{\|g_k\|}\right)^T\right) g_{k+1} = \\
&= g_{k+1} - \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2}(g_{k+1} - g_k) = \\
&= \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_k + \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2 + \|g_k\|^2} g_{k+1}.
\end{aligned} \tag{24}$$

Из (23), (24) следует, что косинус угла ψ_k между векторами $\widetilde{g}_k$ и $\widetilde{g}_{k+1}$ будет

$$\cos\psi_k = \left(\frac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|}, \frac{\widetilde{g}_{k+1}}{\|\widetilde{g}_{k+1}\|}\right) = 1 \Bigg/ \sqrt{1 + h_k \frac{\|g_k\|^2 + \|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}}. \tag{25}$$

Следовательно, один шаг ДФП-метода из Y_k в Y_{k+1} приводит к уменьшению угла между последовательными субградиентами от $\pi/2$ к острому ψ_k, определяемому из условия (25). Это свойство ДФП-метода характерно и для r-алгоритмов, которые построены на идее «расширить» конус возможных направлений убывания функции посредством операции растяжения пространства аргументов в направлении разности двух последовательных субградиентов.

Из (25) следует, что когда $h_k \ll 1$, тогда итерация ДФП-метода близка к итерации предельного варианта r-алгоритмов, который преобразует субградиенты g_k и g_{k+1} так, чтобы в преобразованном пространстве $\cos\psi_k = 1$. Этот же факт следует и из (16), так как когда $h_k \ll 1$, то операция преобразования пространства в ДФП-методе будет близка к растяжению пространства с очень большим коэффициентом в направлении разности двух последовательных градиентов. Такая ситуация будет иметь место для сильно овражных функций, когда итерационный процесс находится в точке, близкой ко «дну» оврага.

Для $r_\mu(\alpha)$-алгоритма, который использует постоянный коэффициент растяжения пространства в направлении $g_{k+1} - g_k$, характерно преобразование прямого угла в острый ψ_k, косинус которого равен

$$\begin{aligned}\cos\psi_k \;&=\; (\alpha^2-1)\Big/\sqrt{\alpha^4+\alpha^2\left(\frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2}+\frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}\right)+1}\leq\\ &\leq\; 1-\frac{2}{\alpha^2+1}.\end{aligned}$$

Здесь преобразование угла между последовательными градиентами прямо не связано с h_k^*, хотя косвенную связь обеспечивает соотношение между нормами векторов g_k и g_{k+1}.

Поэтому для гладких функций преобразование, используемое в ДФП-методе, выглядит более логичным в том смысле, что когда шаг наискорейшего спуска большой, то слабее «растягивается»конус подходящих направлений убывания $f(x)$, а когда шаг наискорейшего спуска малый, то он влечет более сильное «растяжение»конуса. Однако для негладких функций, где h_k может равняться нулю, такое преобразование в принципе не применимо.

Тем не менее это обстоятельство можно использовать для модификации $r_\mu(\alpha)$-алгоритма, чтобы расширить область его применения для класса почти дифференцируемых функций. На самом деле, «ловушки»для минимизирующей последовательности $r_\mu(\alpha)$-алгоритма [14, ст. 110–115] основаны на использовании им постоянного коэффициента растяжения пространства. Заменив на шаге $r_\mu(\alpha)$-алгоритма постоянный коэффициент растяжения на переменный, зависящий от параметров h_k^*, $\|g_k\|$ и $\|g_{k+1}\|$, для такого варианта r-алгоритмов вполне возможно обеспечить выход из «плохих» угловых точек для почти дифференцируемых функций, сохранив при этом для него максимальную «близость» к $r_\mu(\alpha)$-алгоритму.

4. DFPR(α)-алгоритм

Для задачи (1), при условии, что мы умеем точно реализовывать процедуру наискорейшего спуска, построим метод «переменной метрики» промежуточный между ДФП-методом и $r_\mu(\alpha)$-алгоритмом. При этом сохраним как достоинства первого (выбор очередного направления движения), так и второго (метод можно перенести на негладкий случай).

Пусть g_k и g_{k+1} — градиенты $\varphi_k(y) = f(B_k y)$ в точках y_k и y_{k+1}. Здесь y_{k+1} получена согласно шагу наискорейшего спуска в направлении $-g_k$ из точки y_k в пространстве аргументов $Y_k = B_k^{-1}X$. Тогда $\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = 0$. Преобразование пространства из Y_k в Y_{k+1}, которое лежит в основе ДФП-метода, имеет одно «замечательное» свойство – независимо от параметра t_k, движение в пространстве Y_k, которое соответствует направлению образа градиента g_{k+1} в Y_{k+1}, осуществляется по кратчайшему вектору выпуклой комбинации g_k и g_{k+1}. На самом деле, направление движения в Y_k, которое соответствует движению по $\widetilde{g}_{k+1}$ в Y_{k+1} определятся:

$$\begin{aligned}
p_k &= T_k\big(g_k,\ g_{k+1}\big)T_k^T\big(g_k,\ g_{k+1}\big)g_{k+1} = \\
&= \left(I - \Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|} + t_k\frac{g_k}{\|g_k\|}\Big)\Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\Big)^T\right)\times \\
&\qquad\times\left(I - \Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\Big)\Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|} + t_k\frac{g_k}{\|g_k\|}\Big)^T\right)g_{k+1} = \\
&= \left(I - \Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\Big)\Big(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\Big)^T + t_k^2\frac{g_k}{\|g_k\|}\frac{g_k}{\|g_k\|}^T\right)g_{k+1} = \\
&= g_{k+1} - (g_{k+1}-g_k)\,\frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2+\|g_k\|^2} = \\
&= \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_{k+1}\|^2+\|g_k\|^2}g_k + \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k+1}\|^2+\|g_k\|^2}g_{k+1},
\end{aligned} \tag{26}$$

в силу того, что $\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = 0$. Вектор p_k, определяемый согласно (26), есть не что иное, как решение следующей задачи:

$$\min \frac{1}{2}\left\|\lambda_1 g_k + \lambda_2 g_{k+1}\right\|^2, \tag{27}$$

$$\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = 0; \quad \lambda_1+\lambda_2 = 1; \quad \lambda_1 \geq 0; \quad \lambda_2 \geq 0. \tag{28}$$

Поэтому в основу метода целесообразно поставить преобразование, которое лежит в основе ДФП-метода, так как оно обеспечивает достаточно удачное направление движения на шаге в Y_k. Так, для квадратичных функций $f(x)$ размерностью пространства $n = 2$ такое направление движения из точки наискорейшего спуска будет задавать точное направление на минимум независимо от начальной точки. Поэтому для таких функций при произвольном выборе параметра t_k метод будет требовать не более чем два шага наискорейшего спуска.

Однако сходимость метода за n шагов для квадратичных функций при $n \geq 3$ (аналогично, как в ДФП-методе) будет обеспечивать далеко не каждый выбор параметра t_k. Поэтому отбросим условие окончания процесса минимизации за n шагов для квадратичных функций и выбор t_k подчиним условию, чтобы метод приближался к $r_\mu(\alpha)$-алгоритму в том смысле, чтобы преобразование пространства было «сжимающим» пространство субградиентов по типу, как и в $r_\mu(\alpha)$-алгоритме, т. е.

$$\det(B_{k+1}) = \frac{1}{\alpha}\det(B_k), \quad \alpha > 1, \quad \alpha \in [2, 4].$$

Для этого достаточно положить $t_k = \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\|g_{k+1}-g_k\|}{\|g_k\|}$ и для коррекции матрицы $B_{k+1} = B_k T_k\big(g_k,\ g_{k+1}\big)$ выбрать

$$T_k\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = I - \left(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|} + \frac{1}{\alpha}\,\frac{\|g_{k+1}-g_k\|}{\|g_k\|}\,\frac{g_k}{\|g_k\|}\right)\times \\ \times\left(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\right)^T, \quad (29)$$

так как

$$\begin{aligned} &\det\Big(T_k(g_k,\ g_{k+1})\Big) = \\ =\ & 1 - \left(\frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|} + \frac{1}{\alpha}\,\frac{\|g_{k+1}-g_k\|}{\|g_k\|}\,\frac{g_k}{\|g_k\|},\ \frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\right) = \\ =\ & 1 - 1 - \frac{1}{\alpha}\,\frac{\|g_{k+1}-g_k\|}{\|g_k\|}\,\left(\frac{g_k}{\|g_k\|},\ \frac{g_{k+1}-g_k}{\|g_{k+1}-g_k\|}\right) = \\ =\ & \frac{1}{\alpha}\,\frac{\|g_{k+1}-g_k\|}{\|g_k\|}\,\frac{\|g_k\|}{\|g_{k+1}-g_k\|} = \frac{1}{\alpha}. \end{aligned}$$

Из вышеприведенных соображений приходим к следующему методу «переменной метрики» (условимся называть его DFPR(α)-алгоритмом) применительно к решению задачи (1).

DFPR(α)-алгоритм

Шаг 0. Перед началом вычислений имеем $\alpha > 1$, $\varepsilon_g > 0$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $B_0 = I_n$ — единичная матрица размером $n \times n$, $g_0 = \nabla f(x_0)$. Здесь ε_g — достаточно малое число, задающее критерий останова по норме градиента.

Если $\|g_0\| \le \varepsilon_g$, то x_0 — искомая точка и останов. В противном случае переходим к очередному шагу.

Пусть на k-м шаге получены $x_k \in \mathbb{R}^n$, $g_k \in \mathbb{R}^n$, B_k – матрица $n\times n$. Здесь $g_k = \nabla f(x_k)$ — градиент $f(x)$ в точке x_k. Тогда $(k+1)$-й шаг характеризует следующая последовательность операций.

Шаг 1. Положить $\widetilde{g}_k = B_k^T g_k$.

Шаг 2. Положить $\xi_k = B_k \widetilde{g}_k$.

Шаг 3. Вычислить $h_k = \mathrm{argmin}_{h\ge 0}\Big\{f(x_k - h\xi_k)\Big\}$.

Шаг 4. Вычислить очередное приближение $x_{k+1} = x_k - h_k\,\eta_k$.

Шаг 5. Положить $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$. Если $\|g_{k+1}\| \le \varepsilon_g$, то останов и x_{k+1} – искомая точка. В противном случае вычислим

$$\widetilde{g}_{k+1} = B_k^T g_{k+1}, \qquad t_k = \frac{1}{\alpha}\sqrt{1 + \frac{\|\widetilde{g}_{k+1}\|^2}{\|\widetilde{g}_k\|^2}},$$

$$\eta_1 = \frac{\widetilde{g}_{k+1}-\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1}-\widetilde{g}_k\|} + t_k\frac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|}, \quad \eta_2 = \frac{\widetilde{g}_{k+1}-\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_{k+1}-\widetilde{g}_k\|},$$

$$B_{k+1} = B_k\Big(I - \eta_1\eta_2^T\Big).$$

Шаг 6. Переходим к очередному шагу с x_{k+1}, B_{k+1}, g_{k+1}.

Очевидно, что сходимость DFPR(α)-алгоритма к решению x^* для задачи (1) будет обеспечивать процедура наискорейшего спуска в направлении антиградиента. Кроме того, он как и ДФП-метод и r-алгоритмы использует преобразование пространства для того, чтобы расширить конус возможных направлений убывания функции на следующем шаге метода. На самом деле, угол между между последовательными градиентами в Y_{k+1} определяет следующее соотношение:

$$\cos\psi_k = 1 \Bigg/ \sqrt{1 + \left(\frac{1}{\alpha}\left(\frac{\|g_k\|}{\|g_{k+1}\|} + \frac{\|g_{k+1}\|}{\|g_k\|}\right)\right)^2}, \tag{30}$$

и чем больше α, тем сильнее он будет уменьшаться.

Если $\alpha = \infty$, то DFPR(α)-алгоритм будет равносилен предельному варианту r-алгоритмов и для квадратичных функций будет обеспечивать сходимость к x^* за n шагов. Из (30) следует, что если в DFPR(α)-алгоритме заменить постоянный коэффициент α на переменный $\alpha_k = \dfrac{\|g_k\|}{\|g_{k+1}\|} + \dfrac{\|g_{k+1}\|}{\|g_k\|} \geq 2$, то угол между последовательными градиентами будет уменьшаться ровно в два раза, т. е. от $\pi/2$ до $\pi/4$.

Еще одну интересную модификацию DFPR(α)-алгоритма обеспечивает следующий выбор α_k:

$$\alpha_k = \frac{\|g_{k+1}\|}{\|g_k\|}\left(\frac{\|g_k\|}{\|g_{k+1}\|} + \frac{\|g_{k+1}\|}{\|g_k\|}\right) = 1 + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2} > 1,$$

при котором угол между последовательными градиентами будет уменьшаться согласно соотношению

$$\cos\psi_k = 1 \Bigg/ \sqrt{1 + \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}}.$$

При таком выборе α_k очень простой вид принимают как одноранговая матрица обратного преобразования $T_k\big(g_k,\ g_{k+1}\big)$

$$T_k\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = I - \frac{1}{\|g_{k+1} - g_k\|^2} g_{k+1}\big(g_{k+1} - g_k\big)^T,$$

так и матрица преобразования пространства аргументов

$$T_k^{-1}\big(g_k,\ g_{k+1}\big) = I - \frac{1}{\|g_k\|^2} g_{k+1}\big(g_{k+1} - g_k\big)^T.$$

Учитывая, что преобразование пространства направлено на уменьшение угла между двумя последовательными градиентами, DFPR(α)-алгоритм должен быть эффективен для минимизации гладких овражных функций в широком диапазоне значений параметра α, в том числе и при $\alpha \in [2, 4]$. Подтверждением этому могут служить приведенные в табл. 1, 2 результаты численных экспериментов для минимизации квадратичных функций

$$f(x) = \frac{1}{2}\, x^T A x = \frac{1}{2}\sum_{i}^{n} q^{i-1} x_i^2 = Quad(q, n),$$

в том числе и сильно овражных. Для сравнения здесь приведены и результаты работы $r_\mu(\alpha)$-алгоритма при тех же значениях α и параметре $\mu = 0$ ($r_0(\alpha)$-алгоритм). Оба методы работали в одинаковых условиях: начальная стартовая точка $x_0 = (1, 1, \ldots, 1)$; критерий останова — $\varepsilon_g = 10^{-10}$; шаг наискорейшего спуска вычислялся аналитически — $h_k = \dfrac{(g_k,\ \xi_k)}{(A\xi_k,\ \xi_k)}$ и при этом точность выполнения наискорейшего спуска в Y_k была достаточно высокой, т.е. $\left|\left(\dfrac{\widetilde{g}_k}{\|\widetilde{g}_k\|},\ \dfrac{\widetilde{g}_{k+1}}{\|\widetilde{g}_{k+1}\|}\right)\right| < 10^{-14}$.

Табл. 1. Численные эксперименты при малых α [10]

$Quad(q,n)$	**DFPR(α)-алгоритм**			**$r_0(\alpha)$-алгоритм**		
	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 4$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 4$
$Quad(1.1, 200)$	732	581	508	1168	885	775
$Quad(1.1, 130)$	288	241	218	496	419	398
$Quad(1.1, 70)$	88	79	74	178	176	183
$Quad(1.2, 100)$	337	273	239	627	494	457
$Quad(1.2, 50)$	80	69	66	191	176	173
$Quad(2.0, 30)$	103	83	76	273	218	206

Следовательно, можно считать, что результаты, приведенные в табл. 1 и табл. 2, показывают, насколько преобразование насколько преобразование по типу ДФП-метода лучше, чем растяжение пространства в направлении разности двух последовательных градиентов, второй из которых получен согласно шагу наискорейшего спуска в преобразованном пространстве аргументов. Для несильно овражных квадратичных функций ($Quad(1.1,\ 70)$, $Quad(1.2,\ 50)$) работа dpfr(α)-алгоритма при небольших α близка к работе ДФП-метода в том смысле, что обеспечивает сходимость за число шагов, очень близкое к n.

Конечно, разрыв в количестве итераций между dpfr(α)-алгоритмом и $r_0(\alpha)$-алгоритмом должен сокращаться при увеличении α, однако это имеет место при очень больших значениях α. Так, при $\alpha = 1000$ (табл. 2), который нельзя считать малым, этот разрыв все еще достаточно большой. Если dpfr(α)-алгоритм гарантирует сходимость к x^* практически за n шагов, то для $r_0(\alpha)$-алгоритма это не так. Одна из причин такого поведения методов — слишком большая точность решения задач $\varepsilon_g = 10^{-10}$, что равносильно $f(x_k) - f^* < 10^{-20}$. В случае менее жесткого критерия останова разрыв будет меньше, но и число итераций для DFPR(α)-алгоритма будет меньше. Однако такая точность для минимизируемой функции говорит в пользу

DFPR(α)-алгоритма в том смысле, что он достаточно устойчив к точности решения даже для сильно овражных задач.

Табл. 2. Численные эксперименты при больших α [10]

$Quad(q,n)$	**DFPR(α)-алгоритм**			**$r_0(\alpha)$-алгоритм**		
	$\alpha=10$	$\alpha=100$	$\alpha=1000$	$\alpha=10$	$\alpha=100$	$\alpha=1000$
$Quad(1.1,200)$	379	271	221	702	692	550
$Quad(1.1,130)$	177	131	130	391	384	290
$Quad(1.1,70)$	70	70	70	212	177	140
$Quad(1.2,100)$	181	133	107	422	365	276
$Quad(1.2,50)$	54	50	50	185	143	106
$Quad(2.0,30)$	58	42	36	178	120	87

Следовательно, для плохообусловленных задач DFPR(α)-алгоритм можно считать более устойчивым, чем $r_0(\alpha)$-алгоритм, а точнее — преобразование пространства по типу ДФП-метода следует признать более рациональным, чем растяжение пространства в направлении разности двух последовательных градиентов.

5. О субградиентных методах по типу ДФП-метода

DFPR(α)-алгоритм имеет «идеализированный» характер в том смысле, что он предполагает точную процедуру наискорейшего спуска, которая в принципе нереализуема даже для гладких функций. Кроме того, для негладких функций точная процедура наискорейшего спуска гарантирует более сильное условие, чем существование антисубградиента, ортогонального направлению спуска. В частности, угол может быть тупым, т. е. $\big(g_k,\ g_{k+1}\big) < 0$. Поэтому перенос основных принципов DFPR(α)-алгоритма на общий случай минимизации выпуклых функций требует решения двух главных вопросов. Первый — замена преобразования (29) преобразованием, которое бы обеспечивало выбор направления движения, как в DFPR(α)-алгоритме, не только при ортогональных последовательных субградиентах. Второй — замена точного наискорейшего спуска в направлении субградиента некоторой другой регулировкой шагового множителя, которая бы требовала небольшого числа вычислений $f(x)$ и $\partial f(x)$.

Первый вопрос не представляет особых проблем, поскольку независимо от угла между g_k и g_{k+1} в $Y_k = B_k^{-1}X$, выбор направления движения как в DFPR(α)-алгоритме можно сохранить, если для коррекции матрицы $B_{k+1} = B_k T_k(g_k,\ g_{k+1})$ выбрать

$$T_k(g_k,\ g_{k+1}) = I - \left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|} + t_k\Big(g_k - \frac{(g_{k+1},\ g_k)}{\|g_{k+1}\|^2} g_{k+1}\Big)\right)\times$$
$$\times\left(\frac{g_{k+1} - g_k}{\|g_{k+1} - g_k\|}\right)^T. \quad (31)$$

Здесь t_k — некоторый скалярный параметр, от выбора которого зависит сходимость методов.

Второй вопрос, связанный с регулировкой шагового множителя в направлении субградиента, более сложный и приводит к разного рода модификациям. Так, классический фейеровский шаг в направлении субградиента или некоторый его аналог, когда f^* неизвестно, приводит к немонотонным по функционалу субградиентным методам «переменной метрики» на основе преобразования (31). При этом очевидно, что преобразование пространства требуется на тех шагах метода, когда для кратчайшей выпуклой комбинации векторов g_k и g_{k+1} выполнено $\lambda_1 > 0$ и $\lambda_2 > 0$, как в (27)–(28).

Преобразование пространства (31) сильнее расширяет конус возможных направлений убывания функции, чем «ортогонализация»в подобных методах [14, ст. 239–244]. Обоснование сходимости таких методов можно построить аналогично тому, как это сделано в [14], убрав даже требование на ограниченность евклидовой нормы матрицы B_k. Такой способ регулировки шагового множителя требует не более одного вычисления $f(x)$ и $\partial f(x)$ на каждом шаге метода и позволяет за конечное число шагов K либо найти $f(x_K)$ с требуемым значением функции, либо получить достаточные условия расходимости фейеровского процесса, когда вместо f^* используется заниженное значение.

Адаптивный способ регулировки шага [15], который используется в $r(\alpha)$-алгоритме, позволяет получить почти монотонные по функционалу методы. Формально он приводит к замене точного поиска минимума по направлению на приближенный, т. е. $h_k > h_k^*$, но так, чтобы h_k было близко к h_k^*. Здесь h_k^* – точный шаг наискорейшего спуска в направлении антисубградиента. Учитывая, что гарантированное уменьшение нормы субградиента в преобразованном пространстве позволяет просто уточнять шаг наискорейшего спуска в преобразованном пространстве, при такой регулировке шагового множителя достаточно на каждом шаге метода использовать в среднем 2-3 вычисления $f(x)$ и $\partial f(x)$. При адаптивной регулировке шагового множителя можно переходить и в точки с меньшим шагом, чем h_k^*, так одновременное выполнение условий $\|g_k\|^2 > \big(g_k,\ g_{k+1}\big)$ и $\|g_{k+1}\|^2 > \big(g_k,\ g_{k+1}\big)$ позволяет применять преобразование (31) и когда $\big(g_k,\ g_{k+1}\big) > 0$.

Итак, для минимизации выпуклых функций как первый, так и второй способы регулировки шагового множителя позволяют получить практически реализуемые субградиентные методы «переменной метрики» на основе преобразования по типу ДФП-метода в условиях минимального использования информации (только два последовательных субградиента).

Отметим, что вышеобсуждаемые субградиентные методы «переменной метрики» более соответствуют названию работы [16], чем методы, предлагаемые в этой работе, которые послужили основой для создания ε-субградиентных методов в негладкой оптимизации. На самом деле, в ε-субградиентных методах из ДФП-метода взят только принцип движения по направлению, противоположному кратчайшему вектору к выпуклой оболочке двух последовательных субградиентов, и обобщен на случай большего числа векторов. Однако содержательный смысл ДФП-метода состоит не столько в выборе такого направления движения, сколько в применяемом линейном преобразовании пространства, которое позволяет улучшать структуру поверхностей уровня минимизируемой функции.

Заключение

В работе обсуждается B-формы метода Давидона–Флетчера–Пауэлла, которая позволяет интерпретировать его как градиентный метод в преобразованном пространстве аргументов. На ее основе проведено сравнение этого метода с r-алгоритмами. Для минимизации гладких выпуклых функций построен DFPR(α)-алгоритм — градиентный метод с преобразованием пространства, сочетающий свойства как квазиньютоновских методов, так и r-алгоритмов. Обсуждаются возможные схемы такого типа методов для минимизации негладких выпуклых функций.

Отметим, что алгоритм, подобный DFPR(α)-алгоритму, можно построить и на основе линейного одноранговогo оператора для метода Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно [17]. Этот оператор имеет вид

$$T_k(g_k, g_{k+1}) = I + \frac{g_k}{(g_k - g_{k+1}, g_k)} \left(\sqrt{\frac{h_k(g_k, g_k - g_{k+1})}{(g_k, g_k)}}\, g_k + g_{k+1} - g_k \right)^T$$

и используется для пересчета матрицы, обратной к матрице преобразования пространства. Такие алгоритмы тесно связаны с методом Левенберга-Марквардта [5, 18], который является комбинацией метода Ньютона и метода градиентного спуска.

Работа выполнена при поддержке Volkswagen Foundation, грант № 97775.

Литература

1. Полак Э. Численные методы оптимизации. Единый подход. М.: Мир, 1974. 376 с.
2. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 535 с.
3. Пшеничный Б. Н., Данилин Ю. М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. 319 с.
4. Поляк Б. Т. Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983. 384с.
5. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.
6. Журбенко Н. Г. Квазиньтоновские алгоритмы минимизации на основе использования оператора растяжения пространства. *Теория оптимальных решений.* Киев, 1999. С. 45—50.

7. Davidon W. C. Variable metric methods for minimization, AEC Research and Development Rept. ANL 5990 (Rev.), 1959.
8. Fletcher R., Powell M. J. D. A rapidly convergent descent method for minimization. *Comput. J.* 1963. №2(6). P. 163–168.
9. Byrd R. H., Lu P., Nocedal J. Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. 1995. No. 16(5). P. 1190–1208.
10. Стецюк П. И. Квазиньютоновские методы и r-алгоритмы. Препр. НАН Украины. Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова. Киев, 1996. 96–10. 21 с.
11. Шор Н. З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. К.: Наук. думка, 1979. 199 с.
12. Shor N. Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. Boston; Dordrecht; London: Kluwer Academic Publishers, 1998. 412 p.
13. Стецюк П. И. Теория и программные реализации r-алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ.* 2017. №5. С. 43—57.
14. Стецюк П. И. Методы эллипсоидов и r-алгоритмы. Кишинэу: Эврика, 2014. 488 с.
15. Шор Н. З., Стеценко С. И. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. К.: Наук. думка, 1989. 208 с.
16. Lemaréchal C. An extension of Davidon methods to nondifferentiable problems. *Math. Progr. Study.* 3, 1975. P. 95–109.
17. Стецюк П. И. Линейные операторы в квазиньютоновских методах. *Теория и приложения методов оптимизации.* Киев, 1998. С. 3–8.
18. Измаилов А. Ф., Куренной А. С., Стецюк П. И. Метод Левенберга-Марквардта для задач безусловной оптимизации. *Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки.* 2019, Т.24, №125. С. 60–74.

Поступила: 15.12.2021 / Принята: 22.12.2021

B-ФОРМА МЕТОДА ДАВИДОНА-ФЛЕТЧЕРА-ПАУЕЛА

П. Стецюк, В. Стовба, А. Супрун

Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, Національна академія наук України, Київ, Україна, E-mail: {stetsyukp, vik.stovba}@gmail.com, anton_s2007@ukr.net

Анотація. Обговорюється спеціальна форма (B-форма) методів квазіньютонівського типу, яка дозволяє легко інтерпретувати ці методи, як градієнтні в перетвореному відповідним чином просторі аргументів. Наведено B-форму методу Давідона–Флетчера–Пауела та на її основі проведено порівняння цього методу з r-алгоритмами. Для мінімізації гладких опуклих функцій побудовано градієнтний метод з перетворенням простору, що поєднує властивості як квазіньютонівских методів, так і r-алгоритмів. Обговорюються можливі схеми методів такого типу для мінімізації негладких опуклих функцій.

Ключові слова: квазіньютонівські методи, ДФП-метод, перетворення простору, градієнтний метод, r-алгоритм.