

УСКОРЕННЫЕ МОДИФИКАЦИИ СУБГРАДИЕНТНОГО МЕТОДА
ПОЛЯКА ДЛЯ ОВРАЖНЫХ ВЫПУКЛЫХ ФУНКЦИЙ

Стецюк П. И.

Институт кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины

E-mail: stetsyukp@gmail.com

Аннотация. Обсуждаются три субградиентных метода с преобразованием пространства для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном минимальном значении функции. В методах используется шаг Поляка в направлении нормированного анти-субградиента и гарантируется монотонное уменьшение расстояния до точки минимума в последовательно преобразованных пространствах переменных. Преобразование пространства реализуется с помощью однорангового эллипсоидального оператора и направлено на уменьшение степени овражности поверхностей уровня выпуклых функций.

Ключевые слова. Субградиентный метод, шаг Поляка, шаг Агмона-Мощкина-Шенберга, овражная функция, преобразование пространства.

Введение

Данная статья связана с использованием линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций – идеи Н.З. Шора, на которой построены эффективные модификации r -алгоритмов. В ней рассмотрены субградиентные методы с шагом Поляка и преобразованием пространства, обеспечивающие монотонное уменьшение расстояния до точки минимума. Эти методы можно рассматривать как расширение предложенного Б.Т. Поляком в 1969 году субградиентного метода для нахождения точки минимума выпуклой функции при известном оптимальном значении функции. В них длина шага в направлении антисубградиента вычисляется (а не подбирается как в r -алгоритмах из решения одномерной задачи минимизации функции по направлению), причем для ее вычисления требуется лишь знание минимального значения функции.

Субградиентный метод Поляка

Пусть $f(x)$ – выпуклая функция векторного аргумента $x \in R^n$ и ее субградиент $\partial f(x)$ удовлетворяет условию:

$$(x - x^*, \partial f(x)) \geq m(f(x) - f^*), \quad \forall x \in R^n, \forall x^* \in X^*, \quad m \geq 1. \quad (1)$$

Здесь R^n – евклидово пространство размерности n со скалярным произведением (x, y) ; X^* – множество точек минимума функции $f(x)$; f^* – минимальное значение функции $f(x)$: $f^* = f(x^*)$, $x^* \in X^*$. Параметр m считается известным, он введен для учета специальных классов выпуклых функций, например, для квадратичной гладкой функции $m=2$. Значение $m=1$ обеспечивает выполнение условия (1) для произвольной выпуклой функции.

Пусть известно f^* . Для нахождения точки $x^* \in X^*$ применяется субградиентный метод Поляка [1,2]:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{\partial f(x_k)}{\|\partial f(x_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

При $m=1$ метод (2) имеет простой геометрический смысл. Функция $f(x)$ аппроксимируется линейной $\tilde{f}(x) = f(x_k) + (f'(x_k), x - x_k)$ и шаг выбирается так, чтобы эта аппроксимирующая функция стала равной f^* (т.е. $\tilde{f}(x_{k+1}) = f^*$). Для одномерного случая метод Поляка совпадает с методом Ньютона для решения уравнения $f(x) = f^*$.

Величину h_k называют шагом Поляка или шагом Агмона-Мощкина-Шенберга. Этот шаг тесно связан с результатами И.И. Еремина о сходимости итерационных методов аппроксимации неподвижных точек с помощью операторов, обладающих свойством квазисжимаемости (фейеровости) [3]. Впервые такой шаг был использован в [4, 5] в релаксационном (субградиентном) методе для нахождения хотя бы одного решения совместной системы линейных неравенств.

Теорема 1. *Для всех точек, генерируемых методом (2), справедливы неравенства*

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots, \quad (3)$$

и неравенства

$$(x^* - x_{k+1}, -\partial f(x_k)) \geq 0, \quad \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

Доказательство. Для любого $x^* \in X^*$ и произвольного k ($k \geq 0$) имеем

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 = \left\| x_k - x^* - h_k \frac{\partial f(x_k)}{\|\partial f(x_k)\|} \right\|^2 = \|x_k - x^*\|^2 - 2h_k \frac{(x_k - x^*, \partial f(x_k))}{\|\partial f(x_k)\|} + h_k^2.$$

Учитывая, что из (1) следует неравенство

$$\frac{(x_k - x^*, \partial f(x_k))}{\|\partial f(x_k)\|} \geq \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} = h_k,$$

имеем

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - h_k^2 = \|x_k - x^*\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|\partial f(x_k)\|} \right)^2,$$

что дает неравенства (3).

Неравенства (4) следуют из того, что на основании (1) имеем

$$\begin{aligned} (x^* - x_{k+1}, -\partial f(x_k)) &= (x_{k+1} - x^*, \partial f(x_k)) = (x_k - x^* - h_k \frac{\partial f(x_k)}{\|\partial f(x_k)\|}, \partial f(x_k)) = \\ &= (x_k - x^*, \partial f(x_k)) - h_k \|\partial f(x_k)\| = (x_k - x^*, \partial f(x_k)) - m(f(x_k) - f^*) \geq 0. \end{aligned}$$

Теорема 1 доказана.

В теореме 1 отражены два центральных свойства шага Поляка. Первое свойство следует из неравенств (4). Оно означает, что шаг h_k определяет величину максимального сдвига в направлении нормированного антисубградиента, при котором угол между антисубградиентом и направлением из точки x_{k+1} на произвольную точку из множества минимумов будет нетупым. Второе свойство следует из неравенств (3) и означает, что если множество X^* состоит из единственной точки x^* , то шаг h_k выбирается таким, чтобы расстояние от точки x_{k+1} к точке минимума x^* было минимальным.

Проблема овражности

В [1, 2] показано, что метод (2) сходится со скоростью геометрической прогрессии, и отмечается что во многих практических задачах знаменатель прогрессии может оказаться близким к единице. Для гладкого случая этот факт также хорошо известен (градиентные методы медленно сходятся для функций овражного типа). Тот же эффект имеет место и в негладком случае, например, для функции двух переменных $f(x) = |x_1| + t|x_2|$ метод (2) сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\left(1 - \frac{1}{t^2}\right)^{\frac{1}{2}}$, т. е. очень медленно для больших t .

Медленную скорость сходимости метода Поляка проиллюстрируем на примере трех выпуклых функций от двух переменных, первые две функции – негладкие (овражная и существенно овражная), а третья – квадратичная овражная функция. В табл. 1 приведено количество итераций метода (2) для нахождения последовательно уточняемых приближений к единственной точке минимума $x^* = (0, 0)$. Эти приближения заданы десятью последовательно уменьшающимися (на порядок) значениями $\text{epsf} = \varepsilon_f$ (первая колонка в табл. 1). Метод Поляка прекращал работу или на итерации $k = \text{itn}$, для которой $f(x_{\text{itn}}) - f^* \leq \varepsilon_f$, или если превышено максимальное количество итераций, равное 20000.

Колонки itn1 , itn2 и itn3 отвечают овражной кусочно-линейной функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ для значений t равных 3, 9 и 27 соответственно. При расчетах использовалась стартовая точка $x_0 = (1, 1)$ и параметр $m = 1$. Из табл. 1 видим, что количество итераций существенно увеличивается с ростом t . Для того чтобы найти точку, где значение функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + 27|x_2|$ отличается от минимального $f_1^* = 0$ не более, чем на $\varepsilon_f = 10^{-10}$, методу Поляка потребовалось 8634 итерации. Такая

же точность для функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ при $t = 100$ не обеспечивается даже при ста тысячах итераций метода Поляка.

Таблица 1

Сходимость метода Поляка для двумерных овражных функций

epsf	itn1	itn2	itn3	itn4	itn5	itn6	itn7
1.0e-01	14	119	1080	16	6	6	6
1.0e-02	24	212	1919	162	10	10	10
1.0e-03	34	305	2759	1604	12	12	12
1.0e-04	45	398	3598	16004	16	16	16
1.0e-05	55	492	4437	20000	20	20	20
1.0e-06	65	585	5277	20000	22(42)	22(42)	22(42)
1.0e-07	76	678	6116	20000	26(48)	26(52)	26(52)
1.0e-08	86	771	6955	20000	28(54)	30(56)	30(56)
1.0e-09	96	865	7795	20000	32(62)	32(62)	32(62)
1.0e-10	107	958	8634	20000	36(68)	36(70)	36(70)

Для $f_2(x_1, x_2) = \max\{x_1^2 + (2x_2 - 2)^2 - 3, x_1^2 + (x_2 + 1)^2\}$ – существенно овражной кусочно-квадратичной функции зигзаго-образная траектория последовательных приближений метода Поляка дана на рис. 1. Здесь метод Поляка находит приближение, где значение функции $f_2(x_1, x_2)$ отличается от минимального $f_2^* = 1$ не более, чем на 0.0001, только за 16004 итераций (см. колонку itn4 в табл. 1).

Для функций $f_1(x_1, x_2)$ и $f_2(x_1, x_2)$ использовался параметр $m = 1$, который можно применять для произвольной выпуклой функции. Для квадратичной функции $f_3(x_1, x_2) = x_1^2 + tx_2^2, t > 0$ использовался параметр $m = 2$. Он в два раза увеличивает длину шага Поляка, соответствующего параметру $m = 1$, и обеспечивает более быструю скорость сходимости с различных начальных приближений. Количество итераций метода Поляка со стартовой точки $x_0 = (0, 0)$ приведено в колонках itn5, itn6 и itn7 и соответствует значениям t равным 100, 10000 и 1000000. Количество

итераций для всех 10 значений epsf одинаково и не зависит от степени вытянутости поверхности квадратичной функции $f_3(x_1, x_2)$. Отличия наблюдаются лишь при достаточно малых $\varepsilon_f = 10^{-12}, 10^{-14}, 10^{-16}, 10^{-18}, 10^{-20}$, для которых количество итераций приведено в скобках после количества итераций для шести последних значений epsf . Чтобы найти точку минимума квадратичной функции $f_3(x_1, x_2)$ с такой же точностью, как и точку минимума функции $f_1(x_1, x_2)$, нужно взамен ε_f использовать ε_f^2 .

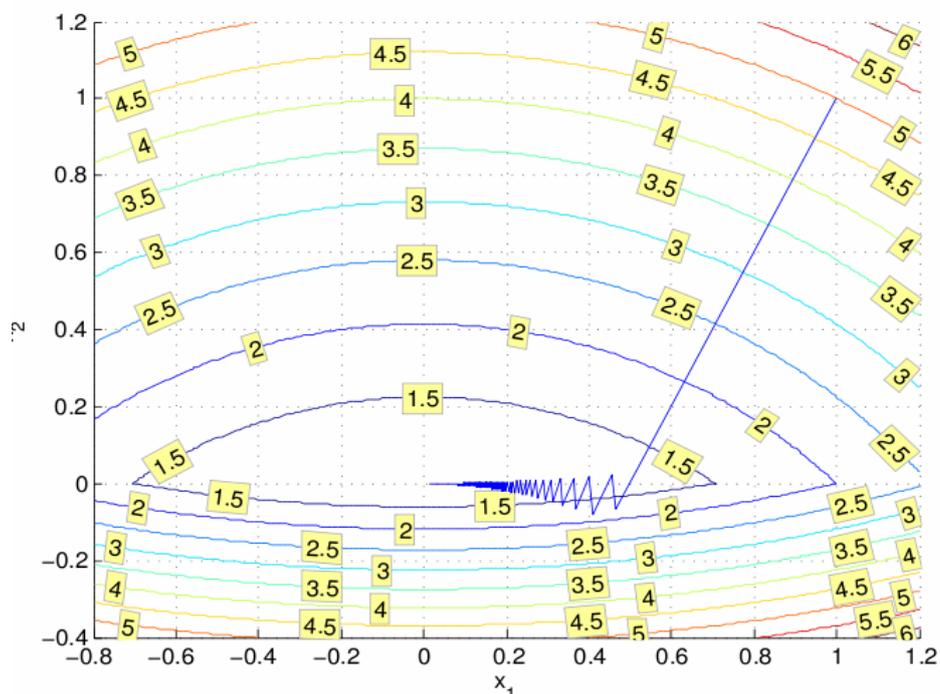


Рис. 1. Траектория метода Поляка для $f_2(x_1, x_2)$ ($x_0 = (1, 1)$)

Следовательно, вопрос об ускорении сходимости метода (2) является актуальным и здесь отметим два способа его ускорения. Первый способ состоит в том, чтобы вблизи минимума функцию $f(x)$ аппроксимировать кусочно-линейной функцией, используя информацию из предыдущих итераций. Самый общий метод, реализующий этот способ, предложен в [2] и имеет следующий вид:

$$x_{k+1} = P_{Q_k}(x_k), \quad Q_k = \{x: f(x_i) + (\partial f(x_i), x - x_i) \leq f^*, \quad i \in I_k\}, \quad (2a)$$

где I_k – любое подмножество индексов из $0, 1, \dots, k$, которое обязательно содержит индекс k , P_{Q_k} – оператор проектирования на множество Q_k .

Метод (2а) также сходится со скоростью геометрической прогрессии и не медленнее, чем метод (2), а его частные случаи очень тесно связаны с другими известными методами. Так, если $I_k = \{0, 1, \dots, k\}$, то метод (2а) дает точный минимум для кусочно-линейной функции, причем он идейно близок к методу Келли [6]. Если множество $I_k = \{k-1, k\}$, то проекцию на множество Q_k можно выписать явно. В этом случае метод (2а) близок к методу из [7], который использует всего два вектора и для построения очередного направления спуска использует линейную комбинацию направления субградиента и направления движения на предыдущем шаге (по типу сопряженных градиентов) с тем, чтобы оно составляло более острый угол с направлением на минимум.

Второй способ ускорения метода (2) базируется на идее Н.З. Шора, связанной с использованием линейных неортогональных преобразований пространства для улучшения обусловленности овражных функций. На этой идее построены эффективные модификации r -алгоритмов [8, 9]. В статье рассмотрим субградиентные методы с шагом Поляка и преобразованием пространства переменных, которое обеспечивает монотонное уменьшение расстояния до точки минимума и направлено на уменьшение степени овражности поверхностей уровня выпуклых функций подобно тому, как это сделано в r -алгоритмах Шора.

Метод Поляка с преобразованием пространства

Пусть произведена замена переменных $x = By$, где B – неособенная $n \times n$ -матрица (т.е. существует обратная матрица $A = B^{-1}$). Субградиент выпуклой функции $f(x)$ в точке x_k удовлетворяет неравенству

$$f(x) \geq f(x_k) + (\partial f(x_k), x - x_k) \quad \forall x \in R^n,$$

откуда, осуществляя замену переменных $x = By$, получаем

$$\phi(y) \geq \phi(y_k) + (B^T \partial f(x_k), y - y_k) \quad \forall y \in R^n,$$

где $\phi(y) = f(By)$. Вектор $\partial \phi(y_k) = B^T \partial f(x_k)$ удовлетворяет неравенству

$$\phi(y) \geq \phi(y_k) + (\partial\phi(y_k), y - y_k) \quad \forall y \in R^n$$

и является субградиентом выпуклой функции $\phi(y)$ в точке $y_k = Ax_k$ преобразованного пространства переменных $y = Ax$.

Для нахождения точки $x^* \in X^*$ субградиентный метод Поляка с преобразованием пространства (определяется невырожденной матрицей B) имеет следующий вид:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{B^T \partial f(x_k)}{\|B^T \partial f(x_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|B^T \partial f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Здесь величина h_k – шаг Поляка (шаг Агмона-Моцкина-Шенберга), но в преобразованном пространстве переменных $y = Ax$. Это следует из того, что в преобразованном пространстве переменных метод (5) записывается как субградиентный процесс

$$y_{k+1} = y_k - h_k \frac{\partial\phi(y_k)}{\|\partial\phi(y_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(\phi(y_k) - \phi^*)}{\|\partial\phi(y_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Шаг Поляка в преобразованном пространстве переменных обладает такими же свойствами как и шаг Поляка в исходном пространстве. Это следует из априорного знания минимального значения функции и связанного с ним неравенства (1).

Теорема 2. Пусть $A = B^{-1}$. Для всех точек, генерируемых методом (5), справедливы неравенства

$$\|A(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|A(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|B^T \partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots, \quad (7)$$

и неравенства

$$(A(x^* - x_{k+1}), -B^T \partial f(x_k)) \geq 0, \quad \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots \quad (8)$$

Доказательство теоремы 2 аналогично доказательству теоремы 1.

Очевидно, что если матрицу B выбрать такой, чтобы вытянутые поверхности уровня овражной функции в преобразованном пространстве

переменных становились менее вытянутыми, то субградиентный метод Поляка с преобразованием пространства (5) окажется эффективнее, чем субградиентный метод Поляка без преобразования пространства (2). Это согласуется с количеством итераций метода (5) для нахождения десяти последовательно уточняемых приближений к точке минимума функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + 10|x_2|$ для шести различных матриц B , каждой из которых соответствует свой столбец *itn* в табл. 2. Матрицы B получены в результате растяжения пространства переменных в направлении x_2 с коэффициентами растяжения $\alpha = 1; 1.5; 2; 3; 4; 5$. Матрица B имеет вид

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix}$$

и если $\alpha = 1$, то она совпадает с единичной матрицей. Это соответствует случаю, когда метод Поляка с преобразованием пространства тождественно равен методу (2) – методу Поляка без преобразования пространства. В табл. 2 ему отвечает столбец *itn1*, где приведено число итераций метода Поляка (2) для нахождения последовательно уточняемых приближений к единственной точке минимума $x^* = (0, 0)$.

Из табл. 2 видим, что количество итераций метода Поляка с преобразованием пространства монотонно уменьшается по мере того, как уменьшается степень овражности функции $\phi_1(y_1, y_2) = |y_1| + \frac{10}{\alpha}|y_2|$ в преобразованном пространстве переменных (соответствует увеличению коэффициента растяжения α).

Если для овражной негладкой функции можно подобрать такую матрицу B , чтобы ускорить сходимость метода Поляка, то для существенно овражной функции это сделать практически невозможно. Об этом говорят результаты о числе итераций метода Поляка с преобразованием пространства для тех же шести матриц B , что и раньше, но для существенно овражной функции $f_2(x_1, x_2) = \max\{x_1^2 + (2x_2 - 2)^2 - 3, x_1^2 + (x_2 + 1)^2\}$. Из табл. 3 видим,

что монотонного уменьшения количества итераций по мере увеличения α – коэффициента растяжения пространства в направлении x_2 здесь не наблюдается. Зато наблюдается некоторый разрыв, который происходит при коэффициенте $\alpha = 2$ (соответствует столбцу itn3). При всех остальных коэффициентах α метод требует максимального количества итераций для достижения точности $\varepsilon_f = 10^{-6}$.

Таблица 2

Сходимость метода Поляка с преобразованием пространства

для кусочно-линейной функции $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + 10|x_2|$

epsf	itn1	itn2	itn3	itn4	itn5	itn6
1.0e-01	147	63	33	6	10	9
1.0e-02	262	114	62	19	17	13
1.0e-03	377	165	91	31	24	18
1.0e-04	492	216	119	44	31	22
1.0e-05	607	268	148	57	38	27
1.0e-06	722	319	177	70	45	31
1.0e-07	837	370	206	82	53	36
1.0e-08	952	421	234	95	60	40
1.0e-09	1000	472	263	108	67	45
1.0e-10	1000	523	292	121	74	49

Таблица 3

Сходимость метода Поляка с преобразованием пространства для

кусочно-квадратичной $f_2(x_1, x_2) = \max\{x_1^2 + (2x_2 - 2)^2 - 3, x_1^2 + (x_2 + 1)^2\}$

epsf	itn1	itn2	itn3	itn4	itn5	itn6
1.0e-01	16	4	4	5	7	8
1.0e-02	162	37	4	6	7	9
1.0e-03	1604	679	5	6	8	9
1.0e-04	10000	7079	5	6	9	446
1.0e-05	10000	10000	6	8	8061	6206
1.0e-06	10000	10000	6	10000	10000	10000
1.0e-07	10000	10000	6	10000	10000	10000
1.0e-08	10000	10000	6	10000	10000	10000
1.0e-09	10000	10000	6	10000	10000	10000
1.0e-10	10000	10000	6	10000	10000	10000

Ниже рассмотрим две модификации метода Поляка с преобразованием пространства, где матрица В будет изменяться, если обнаружена возможность зигзагообразного движения вдоль русла оврага. В этих

модификациях будет использована одноранговая коррекция несимметричной матрицы B только на тех итерациях, когда угол между двумя последовательными субградиентами тупой.

Одноранговый эллипсоидальный оператор

Тупой угол между двумя нормированными векторами ξ и η из R^n можно преобразовать в прямой с помощью линейного оператора из R^n в R^n , который в матричной форме представим

$$T_1(\xi, \eta) = I - \frac{1}{1 - (\xi, \eta)^2} \left(\left(1 - \sqrt{1 - (\xi, \eta)^2} \right) \eta - (\xi, \eta) \xi \right) \eta^T. \quad (9)$$

Здесь $\xi, \eta \in R^n$ – векторы такие, что $\|\xi\|=1$, $\|\eta\|=1$ и их скалярное произведение удовлетворяет условию $(\xi, \eta)^2 \neq 1$, I – единичная матрица размера $n \times n$. Для оператора $T_1(\xi, \eta)$ существует обратный $T_1^{-1}(\xi, \eta)$

$$T_1^{-1}(\xi, \eta) = I + \frac{1}{\sqrt{1 - (\xi, \eta)^2}} \left(\left(1 - \sqrt{1 - (\xi, \eta)^2} \right) \eta - (\xi, \eta) \xi \right) \eta^T \quad (10)$$

Оператор $T_1(\xi, \eta)$ введен в [10] под названием "одноранговый эллипсоидальный оператор". Он связан с преобразованием в шар специального эллипсоида, описанного вокруг тела W (см. рис. 2), которое получено в результате пересечения шара и двух полупространств, проходящих через центр шара. В случае тупого угла между нормальми полупространств этот эллипсоид содержит тело W и является минимальным по объему в рамках семейства эллипсоидов, центр которых совпадает с центром шара (рис. 3).

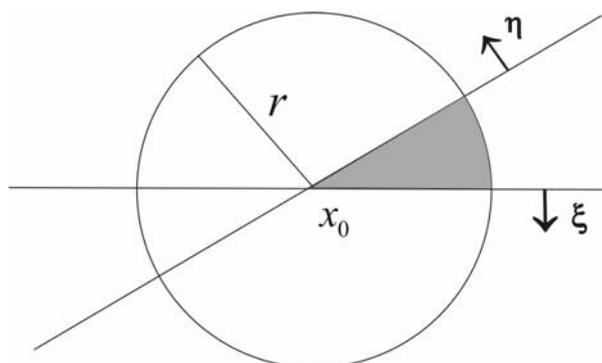


Рис. 2. Тело W (проекция на плоскость)

Минимальный объем эллипсоида меньше, чем объем шара, и это уменьшение определяется величиной $\sqrt{1 - (\xi, \eta)^2}$. Преобразование минимального по объему эллипсоида в шар требует растяжения пространства в направлении $\frac{\xi - \eta}{\|\xi - \eta\|}$ с коэффициентом $\alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{1 + (\xi, \eta)}}$ и "сжатия" пространства в ортогональном направлении $\frac{\xi + \eta}{\|\xi + \eta\|}$ с коэффициентом $\alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{1 - (\xi, \eta)}}$. В преобразованном пространстве эллипсоид станет шаром, а образы векторов ξ и η будут ортогональными (см. рис. 4).

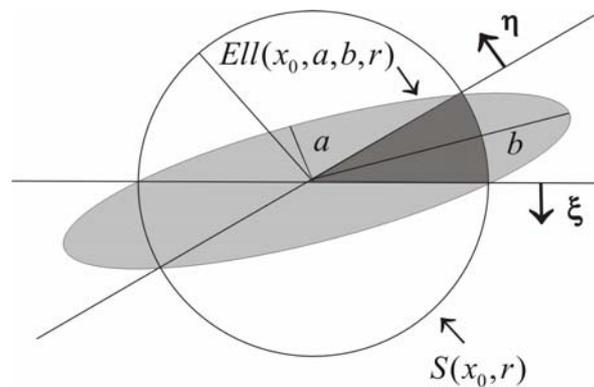


Рис. 3. Специальный эллипсоид, содержащий тело W

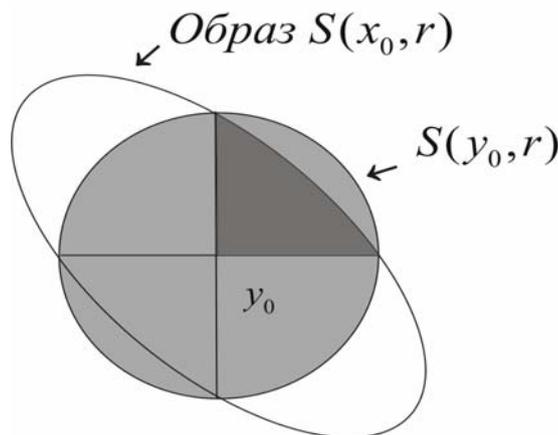


Рис. 4. Оптимальный эллипсоид после преобразования

Ускоренный субградиентный метод Поляка

Медленную сходимость метода Поляка для овражных функций определяет угол между двумя последовательными субградиентами: $\partial f(x_k)$ и

$\partial f(x_{k+1})$. Чем ближе этот угол к 180 градусам, тем более медленной будет скорость сходимости. Тупой угол между векторами $\partial f(x_k)$ и $\partial f(x_{k+1})$ можно преобразовать в прямой с помощью "однорангового эллипсоидального оператора" [10]. Если на каждой итерации избавляться от тупого угла между последовательными субградиентами в преобразованном пространстве переменных, то для овражных функций следует ожидать повышения скорости сходимости метода. Этот принцип реализован в изложенной ниже модификации метода Поляка.

Ускоренный субградиентный метод Поляка имеет следующий вид:

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \frac{B_k^T \partial f(x_k)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (11)$$

где матрица $B_0 = I$, а матрица B_{k+1} размера $n \times n$ вычисляется по правилу:

$$B_{k+1} = \begin{cases} B_k, & \text{если } \mu_k \geq 0 \\ B_k + (B_k \eta) \xi_{k+1}^T, & \text{иначе} \end{cases} \quad (12)$$

где

$$\mu_k = (\xi_k, \xi_{k+1}), \quad \xi_k = \frac{B_k^T \partial f(x_k)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|}, \quad \xi_{k+1} = \frac{B_k^T \partial f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|},$$

$$\eta = \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{\mu_k}{\sqrt{1 - \mu_k^2}} \xi_k.$$

Метод (11), (12) естественно назвать ускоренным методом Поляка за счет антиовражного приема, подобного тому, который использован в r -алгоритмах Шора [8]. Действительно, на k -й итерации растяжение пространства производится в направлении разности нормированных последовательных субградиентов в преобразованном пространстве переменных: $y = A_k x = B_k^{-1} x$, где B_k – невырожденная матрица размерности $n \times n$. Если нормы субградиентов одинаковы, то это направление совпадает с разностью двух последовательных субградиентов, по которой реализуется растяжение пространства в r -алгоритмах. Отличие состоит в том, что в

преобразованном пространстве переменных для r -алгоритмов второй субградиент определяется согласно шагу наискорейшего спуска в направлении антисубградиента, а в методе (9), (10) – согласно шагу Поляка.

Теорема 3. Пусть $A_k = B_k^{-1}$, $A_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$. Для всех точек, генерируемых методом (11), (12), справедливы неравенства

$$\|A_{k+1}(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|A_k(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|} \right)^2, \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots \quad (13)$$

и неравенства

$$(A_k(x^* - x_{k+1}), -B_k^T \partial f(x_k)) \geq 0, \quad \forall x^* \in X^*, k = 0, 1, \dots \quad (14)$$

Доказательство теоремы 3 аналогично доказательству теоремы 2 [10].

Преобразование пространства в методе (11), (12) направлено на уменьшение степени вытянутости поверхностей уровня овражных выпуклых функций. Неравенства (13) означают, что в каждом очередном преобразованном пространстве переменных гарантируется уменьшение расстояния до множества точек минимума. Поэтому для каждой итерации $k > 1$ имеет место неравенство

$$\|A_k(x_k - x^*)\|^2 \leq \|x_0 - x^*\|^2 - \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{m(f(x_i) - f^*)}{\|B_i^T \partial f(x_i)\|} \right)^2.$$

Для овражных функций детерминант матрицы B_k уменьшается, а следовательно, уменьшается объем эллипсоида, локализирующего точку x^* . Действительно, если на k -м шаге реализуется преобразование пространства, то

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \det(I + \eta \xi_{k+1}^T) = \det(B_k) \sqrt{1 - \mu_k^2} = \det(B_k) \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k},$$

где φ_k – тупой угол между двумя последовательными субградиентами.

Для овражных негладких функций метод (11), (12) это обеспечивает ускоренную сходимость по отношению к методу (2). Так, например, для

кусочно-линейной функции двух переменных $f_1(x_1, x_2) = |x_1| + t|x_2|$ при любом значении параметра $t > 1$ и произвольной стартовой точке x_0 метод (11), (12) находит точку минимума $x^* = (0, 0)$ не более, чем за три итерации. Метод (2) сходится к x^* со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\sqrt{1-1/t^2}$ и требует существенного количества итераций даже при сравнительно небольших значениях t . Траектория ускоренного метода Поляка для кусочно-квадратичной функции $f_2(x_1, x_2)$ дана на рис. 5, здесь метод находит точку, где $f_2(x) < 1+10^{-5}$ всего за 16 итераций, а где $f_2(x) < 1+10^{-10}$ – за 31 итерацию.

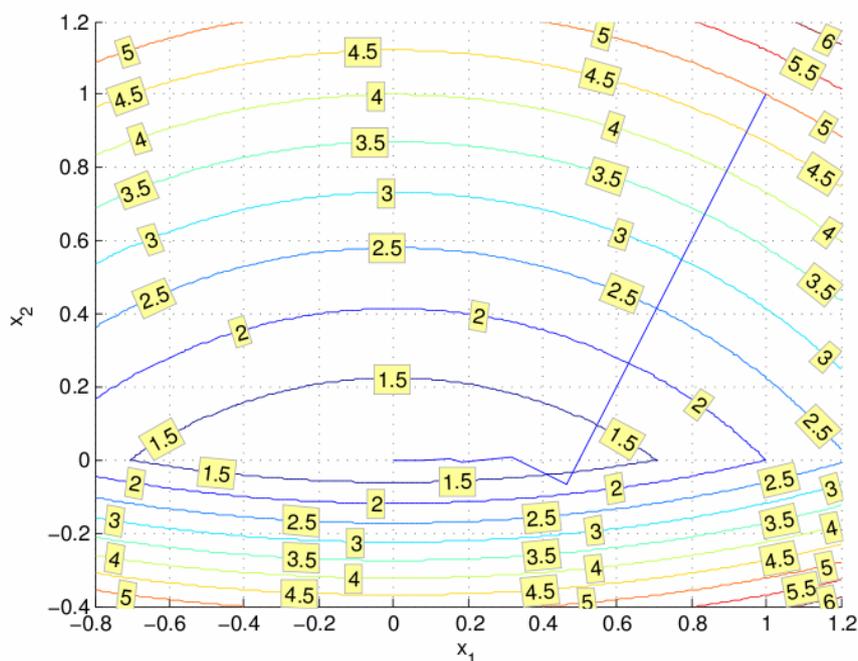


Рис. 5. Траектория ускоренного метода Поляка для $f_2(x_1, x_2)$ ($x_0 = (1, 1)$)

Метод msg2p

Метод (11), (12) можно усилить более радикальным уменьшением объема эллипсоида, локализирующего точку x^* . Если на k -итерации была реализована операция преобразования пространства, то в преобразованном пространстве $Y = A_{k+1}X = B_{k+1}^{-1}X$ для функции $\phi_{k+1}(y) = f(B_{k+1}y)$ субградиенты будут ортогональны и в силу шага Поляка (шага Агмона-Моцкина-Шенберга) полупространства, определяемые ими в точке

$y_{k+2} = A_{k+1}x_{k+2}$, не отсекают точку $y^* = A_{k+1}x^*$. Очевидно, что если вычисленный в точке y_{k+2} субградиент образует тупой угол с двумя предыдущими, то можно уменьшить объем области локализации x^* . Для этого достаточно выбрать в качестве векторов, определяющих оператор $T_1(\xi, \eta)$, субградиент в точке y_{k+2} и вектор, являющийся выпуклой комбинацией первых двух, так, чтобы угол между ними был максимально тупым. Для очередной итерации (если реализуется преобразование пространства) эта ситуация повторяется, только в качестве первого вектора уже будет использоваться не субградиент, а вектор, являющийся выпуклой комбинацией двух предыдущих субградиентов в очередном преобразованном пространстве. Это позволяет замкнуть цикл вычислений и построить конструктивное правило использования в качестве одного из векторов, определяющих оператор $T_1(\xi, \eta)$, агрегированного вектора.

Метод, построенный на этом принципе условимся называть `amsg2p` [11, 12]. В его названии "ams" указывает на способ регулировки шага в направлении нормированного антисубградиента, а «g2p» указывает, что `ams`-шаг используется в пространстве переменных, преобразованном с помощью двух последних субградиентов (g2) и агрегатного вектора (p). Преобразование пространства реализуется с помощью однорангового эллипсоидального оператора и только на тех итерациях метода, когда тупым является хотя бы один из углов – угол между двумя последовательными субградиентами, либо угол между последним субградиентом и агрегатным вектором, который является выпуклой комбинацией вычисленных на предыдущих итерациях субградиентов.

В [13] метод `amsg2p` расширен на случай произвольного значения f_{min} и позволяет либо найти такую точку, где значение выпуклой функции $f(x)$ меньше или равно $f_{min} + \varepsilon$, либо гарантирует достаточное условие того, что точки, где значение $f(x)$ равно f_{min} , в шаре заданного радиуса не существует. В первом случае метод `amsg2p` находит точку

$x_\varepsilon^* \in \{x: f(x) - f_{min} \leq \varepsilon\}$ и соответствующий ей номер итерации k_ε^* , а во втором – останавливается с сообщением «точки не существует». Метод `amsq2p` состоит в следующем.

На итерации $k = 0$ заданы: начальное приближение $x_0 \in R^n$; начальный радиус r_0 такой, что $\|x_0 - x^*\| \leq r_0$; достаточно малое $\varepsilon > 0$. Вычислим $f(x_0)$ и $\partial f(x_0)$. Если $f(x_0) - f_{min} \leq \varepsilon$, то $x_\varepsilon^* = x_0$, $k_\varepsilon^* = 0$ и окончание алгоритма. Иначе положим $h_0 = \frac{m(f(x_0) - f_{min})}{\|\partial f(x_0)\|}$, $\xi_0 = \frac{\partial f(x_0)}{\|\partial f(x_0)\|} \in R^n$, $p_0 = 0 \in R^n$, $B_0 = I$ – единичная $n \times n$ – матрица. Перейдем к следующей итерации.

Пусть на k -й итерации получены $x_k \in R^n$, h_k , r_k , $\xi_k \in R^n$, $p_k \in R^n$, B_k – матрица $n \times n$. Для $(k + 1)$ -й итерации выполним пп. 1 - 5.

1. Вычислим $t_k = h_k / r_k$. Если $t_k > 1$, то "точки не существует" и окончание алгоритма. Иначе положим $r_{k+1} = r_k \sqrt{1 - t_k^2}$ и вычислим очередное приближение

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k.$$

2. Вычислим $f(x_{k+1})$ и $\partial f(x_{k+1})$. Если $f(x_{k+1}) - f_{min} \leq \varepsilon$, то $x_\varepsilon^* = x_{k+1}$, $k_\varepsilon^* = k + 1$ и окончание алгоритма. Иначе положим

$$\xi_{k+1} = \frac{B_k^T \partial f(x_{k+1})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}, \quad h_{k+1} = \frac{m(f(x_{k+1}) - f_{min})}{\|B_k^T \partial f(x_{k+1})\|}.$$

3. Вычислим $\lambda_1 = -p_k^T \xi_{k+1}$ и $\lambda_2 = -\xi_k^T \xi_{k+1}$. Положим

$$p_{k+1} = \begin{cases} \frac{\lambda_1}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}} p_k + \frac{\lambda_2}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}} \xi_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 > 0, \\ p_k, & \text{если } \lambda_1 > 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0, \\ \xi_k, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 > 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_1 \leq 0 \text{ и } \lambda_2 \leq 0. \end{cases}$$

4. Вычислим $\mu_k = p_{k+1}^T \xi_{k+1}$. Если $-1 < \mu_k < 0$, то вычислим

$$B_{k+1} = B_k + (B_k \eta) \xi_{k+1}^T, \text{ где } \eta = \left(\frac{1}{\sqrt{1-\mu_k^2}} - 1 \right) \xi_{k+1} - \frac{\mu_k}{\sqrt{1-\mu_k^2}} p_{k+1},$$

и пересчитаем

$$h_{k+1} = \frac{h_{k+1}}{\sqrt{1-\mu_k^2}}, \quad p_{k+1} = \frac{1}{\sqrt{1-\mu_k^2}} (p_{k+1} - \mu_k \xi_{k+1}).$$

Иначе положим $B_{k+1} = B_k$ и $p_{k+1} = 0$.

5. Перейдем к следующей итерации с x_{k+1} , h_{k+1} , r_{k+1} , ξ_{k+1} , p_{k+1} , B_{k+1} .

Теорема 4. Пусть $A_k = B_k^{-1}$, $A_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$. Если $f_{\min} \geq f^*$ и $X^* = x^*$, то для всех точек, генерируемых методом *amsg2p*, справедливы неравенства

$$\|A_{k+1}(x_{k+1} - x^*)\|^2 \leq \|A_k(x_k - x^*)\|^2 - \left(\frac{m(f(x_k) - f_{\min})}{\|B_k^T \partial f(x_k)\|} \right)^2, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (15)$$

и неравенства

$$(A_k(x^* - x_{k+1}), -B_k^T \partial f(x_k)) \geq 0, \quad \forall x^* \in X^*, \quad k = 0, 1, \dots \quad (16)$$

Теорема 4 означает, что в каждом очередном преобразованном пространстве переменных расстояние до точки минимума уменьшается.

Благодаря этому для каждой итерации $k > 1$ имеем неравенство

$$\|A_k(x_k - x^*)\|^2 \leq \|x_0 - x^*\|^2 - \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{m(f(x_i) - f_{\min})}{\|B_i^T \partial f(x_i)\|} \right)^2 = r_0^2 - \sum_{i=0}^{k-1} h_i^2 = r_k^2,$$

с помощью которого обеспечивается достаточное условие отсутствия точки x_ε^* при $f_{\min} < f^* - \varepsilon$ (реализовано в п. 1 метода *amsg2p*).

Антиовражная техника в методе *amsg2p* направлена на уменьшение степени овражности поверхностей уровня выпуклых функций подобно тому, как это сделано в r -алгоритмах [8]. Детерминант матрицы B_k

уменьшается, так как, если на k -м шаге реализуется преобразование пространства, то $\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \det(I + \eta \xi_{k+1}^T) = \det(B_k) \sqrt{1 - \mu_k^2}$. Для

овражных функций это обеспечивает ускоренную сходимость метода `amsg2p` при произвольной начальной стартовой точке x_0 и достаточно малых значениях параметра ε ($\varepsilon : 10^{-10} - 10^{-14}$).

В табл. 4 приведены результаты вычислительных экспериментов для квадратичных функций от $n = 200$ переменных с различной степенью овражности (рассматривалась функция $f(x) = \sum_{i=1}^n q^{i-1} x_i^2$, а степенью овражности считалась величина $Q = q^{n-1}$).

При расчетах использовался параметр $m = 2$, $f_{min} = f^* = 0$, $x_0 = (1, \dots, 1)^T$. Для ряда стремящихся к нулю ε в таблице даны затраты в числе итераций, которые требуются при степенях овражности $Q1 = 10$, $Q2 = 100$, $Q3 = 1000$, $Q4 = 10^6$, $Q5 = 10^9$.

Таблица 4

Сходимость `amsg2p` для квадратичных функций, $n = 200$

eps	itn(Q1)	itn(Q2)	itn(Q3)	itn(Q4)	itn(Q5)
1.00E-003	11	36	84	361	773
1.00E-005	15	46	99	405	826
1.00E-007	18	56	113	430	868
1.00E-009	22	65	128	461	916
1.00E-011	25	73	142	493	947
1.00E-013	29	81	154	517	979
1.00E-015	32	89	167	541	1006
1.00E-017	35	96	180	560	1027
1.00E-019	39	102	189	574	1042
1.00E-020	41	105	196	585	1048

Метод `amsg2p` можно использовать для того, чтобы достаточно точно найти приближение к единственной точке минимума существенно овражных функций. Проиллюстрируем это на примере известной тестовой задачи `maxquad` [14], которая связана с минимизацией существенно овражной выпуклой кусочно-квадратичной функции $f(x) = \max_{1 \leq k \leq 5} \phi_k(x)$, $x \in R^{10}$. Здесь

$\phi_k(x) = x^T H_k x - b_k^T x$, H_k – симметрические 10×10 -матрицы, такие что

$H_{kij} = e^{ij} \cos(ij) \sin k$, если $i < j$, и $H_{kii} = i|\sin k|/10 + \sum_{j \neq i} |H_{kij}|$, а компоненты векторов b_k определяются $b_{ki} = e^{ik} \sin(ik)$.

Затраты метода `amsg2p` для нахождения в задаче `maxquad` единственного решения с достаточно высокой точностью (до 14-ти значащих цифр) позволяет оценить приведенный ниже фрагмент численных расчетов с одноименной программой `amsg2p` на языке `octave` [15].

```

Maxquad: f(x0)    5.3370664293114e+003
          fmin = -8.4140833459641e-001
..epsf..  .....f(itn).....  .itn.
1.0e-001  -7.7355266120112e-001    17
1.0e-003  -8.4084776169123e-001    29
1.0e-004  -8.4132394277880e-001    35
1.0e-005  -8.4140078034524e-001    41
1.0e-006  -8.4140807664455e-001    49
1.0e-011  -8.4140833458913e-001    94
1.0e-012  -8.4140833459555e-001   101
1.0e-013  -8.4140833459633e-001   110
1.0e-014  -8.4140833459640e-001   116
1.0e-015  -8.4140833459641e-001   122

```

Здесь $m=1$, $x_0 = (1, \dots, 1)^T$ и $\varepsilon = \text{epsf}$.

Вычислительные эксперименты

Теорема 4 обеспечивает обоснование сходимости метода `amsg2p` аналогично тому как теорема 3 – сходимость метода (11), (12). Но более сильное уменьшение объема эллипсоида, локализирующего точку x^* , обеспечивает для овражных функций его ускоренную сходимость по сравнению с методом (11), (12). По количеству итераций метод `amsg2p` сравним с r -алгоритмом, а в ряде случаев и превосходит его. Это подтверждают результаты тестовых экспериментов из [11], которые приведены на рис. 6. Рассматривались 7 известных тестовых задач безусловной минимизации гладких и негладких выпуклых функций [16]

(стр. 279–282) и кусочно-квадратичная функция [8] (стр. 176). Количество переменных в тестовых примерах было от 5 до 50. Все примеры решались r -алгоритмом с критериями останова $\varepsilon_x = 10^{-6}$ и $\varepsilon_g = 10^{-6}$ и методом amsg2p при достаточно малых $\varepsilon_f = 10^{-8}$ и $\varepsilon_f = 10^{-12}$. Число затраченных методами итераций дано на рис. 4. Из него видим, что только в одном случае метод amsg2p уступил r -алгоритму (пример № 2).

На рис. 7 приведены количества итераций метода amsg2p и программной реализации r -алгоритма, которую выполнил Д.Л. Крошко, для пяти тестовых примеров из [16] (их номера находятся под столбцами диаграммы). Из диаграммы видим, что для четырех тестовых примеров из пяти выигрыш amsg2p по количеству итераций составляет более чем в два раза.

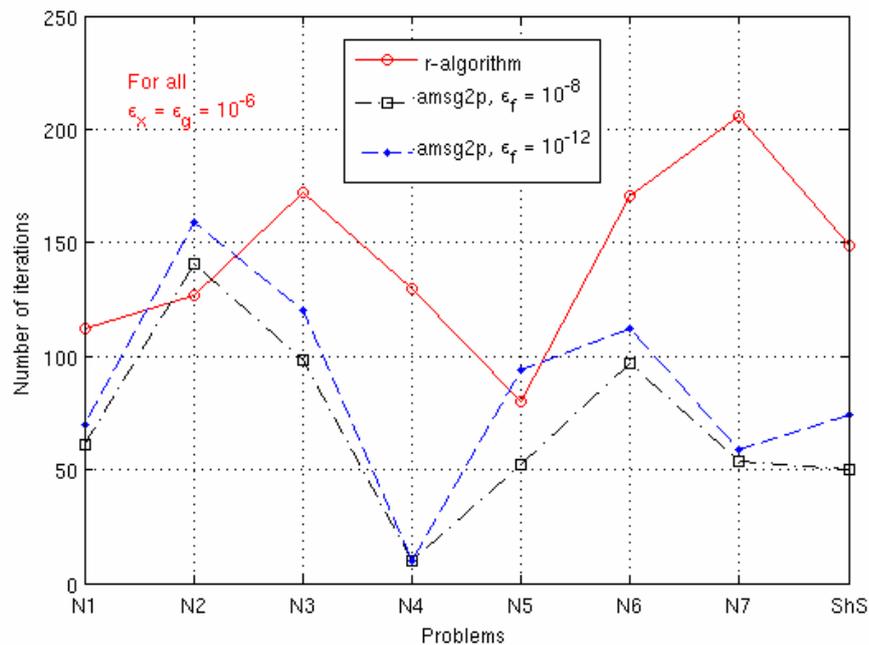


Рис. 6. Сравнение amsg2p и r -алгоритма для восьми функций [11]

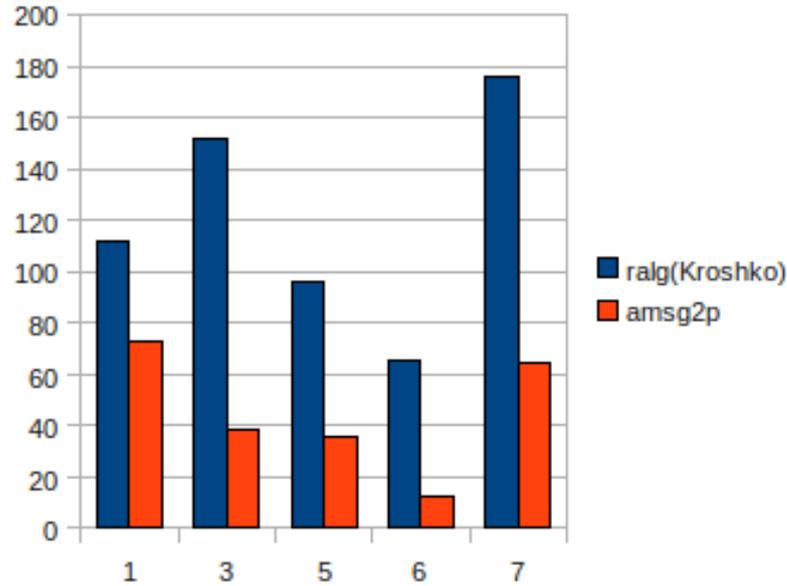


Рис. 7. Сравнение amsg2p и r -алгоритма в реализации Д.Л. Крошко для пяти тестовых примеров из монографии [16]

Вычислительную эффективность метода (11), (12) и метода amsg2p по отношению к методу Поляка приведем на примере кусочно-линейной и квадратичной функций от 20 переменных из работы [17]. Основным показателем эффективности методов будем считать не время вычислений, а число итераций, т.е. число вычислений $f(x)$ и $\partial f(x)$. Рассматривались кусочно-линейная функция $f(x) = \sum_{i=1}^{20} (1 + 1/4)^{i-1} |x_i|$ (обозначена *Sabs* (1.25)) и квадратичная функция $f(x) = \sum_{i=1}^{20} (1 + 1/2)^{i-1} x_i^2$ (обозначена *Squad* (1.5)). Для функции *Sabs*(1.25) использован параметр $m = 1$, а для функции *Squad* (1.5) – параметр $m = 2$. Количество итераций для всех трех методов (polyak, amsg2 и amsg2p) при разных значениях ε приведены в табл. 5, где "прочерк" означает, что метод не решил задачу за 10000 итераций.

Из табл. 5 видим, что методы (11), (12) и amsg2p намного эффективнее, чем метод Поляка без преобразования пространства. Число итераций для них увеличивается слабо при значительном уменьшении ε . Это подтверждает, что преобразования пространства переменных, направленные на уменьшение степени вытянутости поверхностей уровня выпуклых функций, способны для

овражных функций значительно ускорить сходимость субградиентных методов с шагом Поляка.

Таблица 5

Вычислительные эксперименты из [17]

ε	sabs(1.25), $n=20, m=1$			squad(1.5), $n=20, m=2$		
	polyak	amsq2	amsq2p	polyak	amsq2	amsq2p
10^1	289	48	20	601	32	15
10^0	1163	84	31	1205	36	19
10^{-1}	2737	102	42	2047	46	20
10^{-2}	4306	108	48	3079	51	23
10^{-3}	5869	113	55	4237	56	25
10^{-4}	7425	119	68	5463	58	25
10^{-5}	8943	161	78	6719	61	25
10^{-6}	–	197	95	7985	65	26
10^{-8}	–	214	107	–	68	27
10^{-10}	–	228	119	–	71	32
$F(x_0)$	5567.1151			2194649.4419		

Заключение

Несмотря на то, что r -алгоритмы используются уже 40 лет, проблема обоснования их сходимости для всего класса выпуклых функций остается открытой и в настоящее время. Еще в 1982 г. Н.З. Шор и В.И. Гершович в работе [18] отметили: «Теория всего класса алгоритмов с растяжением пространства далека от совершенства. Нам кажется достаточно реалистичной целью – построение такого алгоритма, который по своей практической эффективности не уступал бы r -алгоритму и был столь же хорошо обоснован, как метод эллипсоидов». Шагом в этом направлении можно считать алгоритм (11), (12), где для преобразования специального эллипсоида в шар используется антиовражный прием, близкий к тому, который имеет место в r -алгоритмах. Однако, здесь растяжение пространства реализуется в направлении разности двух нормированных субградиентов, и близким к направлению разности двух субградиентов оно будет только тогда, когда нормы субградиентов близки.

В заключение отметим, что ускоренные варианты субградиентных методов на основе однорангового эллипсоидального оператора можно построить и для других способов регулировки шага. Замечательной чертой

таких методов есть полная определенность в параметрах преобразования пространства.

Список литературы

- [1] Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384 с.
- [2] Поляк Б.Т. Минимизация негладких функционалов // Журн. вычислит. математики и матем. физики. – 1969. – Т.9. – № 3. – С. 507 – 521.
- [3] Васин В.В., Еремин И.И. Операторы и итерационные процессы фейеровского типа (теория и приложения). – Москва; Ижевск: Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 200 с.
- [4] Agmon S. The relaxation method for linear inequalities // Canadian Journal of Mathematics, 1954. – №6. – Pp. 382 – 392.
- [5] Motzkin T., Schoenberg I.J. The relaxation method for linear inequalities // Canadian Journal of Mathematics, 1954. – №6. – Pp. 393 – 404.
- [6] Kelley J. E.. The cutting plane method for solving convex programs. J. Soc. for Industr. and Appl. Math., 1960. – Vol. 8. – № 4. – Pp. 703 – 712.
- [7] Camerini P., Fratta L., Maffioli F. On improving relaxation methods by modified gradient techniques // Math. Program., 1975. – Study 3. – P. 26 – 34.
- [8] Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. – Киев: Наук. думка, 1979. – 199 с.
- [9] Шор Н.З., Журбенко Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов // Кибернетика, 1971. – № 3. – С. 51 – 59.
- [10] Стецюк П.И. Ортогонализирующие линейные операторы в выпуклом программировании (Часть I) // Кибернетика и системный анализ, 1997. – № 3. – С. 97 – 119.
- [11] Стецюк П. И. Субградиентные методы переменной метрики, использующие шаг Агмона-Моцкина и одноранговый эллипсоидальный опера-

- тор // Труды АТИК 2007–2008. – Кишинэу: Эврика, 2009. – Т. I (XII). – С. 16 – 25.
- [12] Стецюк П.И. Ускоренные по Шору модификации субградиентного метода Поляка // Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии: материалы 3-й Междунар. науч. конф. (Кишинэу, 19-23 марта 2012 г.): Кишинэу: Эврика, 2012. – С. 509 – 519.
- [13] Стецюк П.И. Релаксационный субградиентный метод минимизации овражных выпуклых функций // Проблемы теоретической кибернетики. Материалы XVI Международной конференции (Нижний Новгород, 20-25 июня 2011 г.) / Под ред. Ю.И.Журавлева. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2011. – С. 449 – 453.
- [14] Lemarechal C. Numerical experiments in nonsmooth optimization // In: Progress in nondifferentiable optimization /Ed. E. A. Nurminski. CP-82-58. – Laxenburg: International Institute for Applied System Analysis, 1982. – P. 61 – 68.
- [15] Octave [Электронный ресурс]: <http://www.octave.org/> – Режим доступа: свободный.
- [16] Ржевский С.В. Монотонные методы выпуклого программирования. – Киев: Наукова думка, 1993. – 324 с.
- [17] Журбенко М.Г., Стецюк П.И. Субградієнтні методи змінної метрики для розв'язування яружних задач оптимізації. – Київ, 2009. – 27 с. – (Препр. / НАН України. Ін-т кібернетики імені В.М.Глушкова; 2009-3)
- [18] Гершович В.И., Шор Н.З. Метод эллипсоидов, его обобщения и приложения // Кибернетика, 1982. – № 5. – С. 61 – 69.