УДК 512.25/26+513.88

МЕТОД МИНИМИЗАЦИИ ОВРАЖНЫХ ФУНКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ ВЫДЕЛЕНИЯ СИНГУЛЯРНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

В.В.Калашников

В настоящей работе предлагается другой вариант уже изложенного ранее [I] метода раздельных шагов, предложенного для решения задачи безусловной минимизации

$$f(x) \longrightarrow \min_{x \in R^n} , \tag{I}$$

где выпуклая дифференцируемая функция $f: R^n \to R$ предполагается овражной. Это значит, что в окрестности точки $x^* \in R^n$, являющейся решением задачи (I), поверхности уровня функции f сильно вытянуты вдоль каких-либо направлений. Известно, что это обстоятельство порождает серьезные трудности при реализации стандартных методов минимизации. Для борьбы с плохой обусловленностью задачи (I) здесь, как и в [I], предлагается выделять "сингулярные" направления (направления почти "поперек" оврага поверхностей уровня функции f) и раздельно осуществлять сдвиги в подпространстве, натянутом на выделенные "сингулярные" направления, и в ортогональном дополнении к нему.

§I. Описание алгоритма

Пусть $f: R^n \to R$ – выпуклая дифференцируемая функция. Через $f'(x)$ обозначим градиент функции f , считая его вектор-столбцом.

I) Начинаем с произвольной точки $x_0 \in R^n$. На протяжении всего процесса зафиксированы постоянные $\varepsilon > 0$ и $q > 0$, причем $q \leqslant 1/2$. Вычисляем $f(x_0)$ и $f'(x_0)$ и переходим к п.2).

2) К началу $(k+1)$ -го шага имеем:

- текущее приближенное решение $x_k \in R^n$;
- значение $f(x_k)$ и вектор-столбец $f'(x_k)$;
- матрицу P_l размером $n \times l$, столбцами которой являются накопленные к данному моменту попарно-ортогональные векторы сингулярных направлений $p_1, p_2, \ldots, p_l$; если $l=0$, то P_l - пустая матрица;
- матрицу $P_{l,d}$, являющуюся приближением матрицы $[f''(x_l) P_l]$.

Кроме того, имеется (быть может, пустая) $(l \times l)$ - матрица H_l^{-1}, где H_l - приближение матрицы вторых производных функции цели f по сингулярным направлениям $p_1, p_2, \ldots, p_l$. Еще имеем начальную длину шага $\alpha_0 > 0$ и параметр S , удовлетворяющий условию $S \geq 2(1-\varepsilon)/\alpha_0$.

Проверяем выполнение какого-нибудь заранее определенного критерия останова, например условия $|f'(x_k)| < \varepsilon$. Если критерий выполнен, то процесс окончен, x_k - искомое решение. Если критерий не выполнен, то переходим к п.3).

3) Если $l=0$, т.е. сингулярных направлений нет, то переходим к п.4. Если $l \geq 1$, то совершаем сдвиг квазиньютоновского типа в подпространстве накопленных сингулярных направлений: полагаем

$$\bar{x}_{k,l} = x_k + \beta_k z_l ,$$

где

$$z_l = -P_l H_l^{-1} P_l^T f'(x_k), \qquad (2)$$

а

$$\beta_k = \arg \min_{\beta \in R} f(x_k + \beta z_l). \qquad (3)$$

Находим $f'(\bar{x}_{k,l})$, и если $|f'(\bar{x}_{k,l})| < \varepsilon$, то процесс окончен. Если нет - переходим к п. 4).

4) Делаем попытку градиентного сдвига из точки $\bar{x}_{k,l}$ в виде

$$x_{k,l} = \bar{x}_{k,l} - \alpha_0 f'(\bar{x}_{k,l}).$$

Если выполняется неравенство

$$f(x_{k,l}) \leq f(\bar{x}_{k,l}) - \alpha_0 q |f'(\bar{x}_{k,l})|^2, \qquad (4)$$

то полагаем $x_{k+1}=x_{k,\ell}$ и, вычислив $f'(x_{k+1})$ и решив вопрос о сохранении на следующий шаг или аннулировании накопленных сингулярных направлений, переходим к п.2), начиная $(k+2)$-й шаг. В противном случае переходим к п.5).

5) Так же, как в [I], вычисляем величину

$$\Upsilon = 2\cdot\frac{f(x_{k,\ell})-f(\bar{x}_{k,\ell})+\alpha_0|f'(x_{k,\ell})|^2}{\alpha_0^2|f'(\bar{x}_{k,\ell})|^2};$$

если $\Upsilon \leq S$, то дробим α_0, полагая $\alpha_0 := \alpha_0/2$, и возвращаемся к п.4). Точно так же поступаем, если $\ell = n$. Если же $\Upsilon > S$ и $\ell < n$, то переходим к п.6).

6) В случае квадратичной функции цели, очевидно, имеем соотношение

$$f'(\bar{x}_{k,\ell}) = -(E-P_\ell P_\ell^T)f'(\bar{x}_{k,\ell}) \qquad (5)$$

в силу определения точки $\bar{x}_{k,\ell}$. В общем случае, когда выпуклая функция f не является квадратичной, принимаем следующую предосторожность: если

$$|(E-P_\ell P_\ell^T)f'(\bar{x}_{k,\ell})| < \varepsilon_1\cdot|f'(\bar{x}_{k,\ell})|$$

(здесь $\varepsilon_1>0$ - заранее определенное число, не больше единицы), то дробим α_0, аннулируем накопленные сингулярные направления P_ℓ и матрицу H_ℓ^{-1} (как уже слишком "неточную") и возвращаемся в п.4). В противном случае выделяем так же, как в [I], $(\ell+1)$-е сингулярное направление

$$p_{\ell+1} = -\frac{(E-P_\ell P_\ell^T)[f'(\bar{x}_{k,\ell})-f'(\bar{x}_{k,\ell})]}{|(E-P_\ell P_\ell^T)[f'(\bar{x}_{k,\ell})-f'(x_{k,\ell})]|}$$

и переходим к п.7).

7) В качестве направления сдвига по сингулярным направлениям выбираем вектор

$$z_{\ell+1} = p_{\ell+1} - P_\ell H_\ell^{-1} P_{\ell,d}^T\, p_{\ell+1}. \qquad (6)$$

Если

$$|z_{\ell+1}^T f'(\bar{x}_{k,\ell})| < \varepsilon_1\cdot|f'(\bar{x}_{k,\ell})|,$$

то так же, как в п.6), дробим α_0, аннулируем накопленные сингулярные направления и матрицу H_ℓ^{-1} и переходим к п.4).

В противном случае совершаем сдвиг по z_{l+1}, полагая

$$\bar{x}_{k,l+1} = \bar{x}_{k,l} + \beta_{l+1} z_{l+1},$$

где, как и ранее,

$$\beta_{l+1} = \arg\min_{\beta \in R} f(\bar{x}_{k,l} + \beta z_{l+1}). \tag{7}$$

Если точка $\bar{x}_{k,l+1}$ не удовлетворяет критерию остановки, то переходим к п.8).

8) Дополняем матрицу P_l до P_{l+1} столбцом $(l+1)$-го сингулярного направления p_{l+1}. Так как $\beta_{l+1} \neq 0$, то можем найти векторы

$$\omega_{l+1} = [f'(\bar{x}_{k,l+1}) - f'(\bar{x}_{k,l})]/\beta_{l+1}, \tag{8}$$

$$\tilde{p}_{l+1} = \omega_{l+1} + P_{l,d} H_l^{-1} P_{l,d}^T p_{l+1}. \tag{9}$$

Вектором $\tilde{p}_{l+1}$ дополняем матрицу $P_{l,d}$ до матрицы $P_{l+1,d}$. Наконец, полагая $\gamma_{l+1} = P_{l+1}^T \omega_{l+1}$ и $u_{l+1} = P_{l+1}^T z_{l+1}$, пересчитываем H_{l+1}^{-1} по формуле ДФП (Дэвидона – Флетчера – Пауэлла) [3, гл.3]:

$$H_{l+1}^{-1} = \tilde{H}_{l+1}^{-1} - \frac{\tilde{H}_{l+1}^{-1}\gamma_{l+1}\gamma_{l+1}^T\tilde{H}_{l+1}^{-1}}{\gamma_{l+1}^T\tilde{H}_{l+1}^{-1}\gamma_{l+1}} + \frac{u_{l+1}u_{l+1}^T}{\gamma_{l+1}^T u_{l+1}}, \tag{10}$$

где

$$\tilde{H}_{l+1}^{-1} = \left(\begin{array}{c|c} H_l^{-1} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \hline 0 \dots 0 & 1 \end{array}\right) \Big\} l \tag{11}$$

Затем переходим к п.4).

Описание алгоритма закончено. Обоснование корректности формулы (10) будет дано в §2. В заключение этого параграфа сформулируем кратко суть механизма работы метода. Для простоты рассмотрим первый шаг. Сначала производится "разведка": попытка сдвига по направлению антиградиента функции цели. Если она оказывается удачной (в смысле достаточного убывания целевой функции), то этот сдвиг принимается и шаг окончен. Если же сдвиг неудачен и причиной этого явилась направленность антиградиента "поперек" оврага, то вектор $-f'(x_k)$ разлагается на взаимно ортогональные сингулярное и несингулярное направления. При этом в качестве сингулярного берется направление разности двух последовательных градиентов целевой функции:

$$p_1 = -\frac{f'(\bar{x}_{k,0}) - f'(x_{k,0})}{|f'(\bar{x}_{k,0}) - f'(x_{k,0})|} .$$

Но в отличие от γ-алгоритмов Н.З.Шора [2] в предлагаемом методе не производится затем растяжение пространства переменных вдоль сингулярного направления, а делается сдвиг в подпространстве накопленных сингулярных направлений. После этого делается снова попытка сдвига по новому антиградиенту целевой функции и т.д. Заметим еще, что в методе используются только значения функции цели и ее первых производных. Метод рассчитан на случай, когда размерность подпространства овражности функции цели f невелика по сравнению с числом переменных n.

§2. Сходимость и скорость сходимости метода

Пусть целевая функция f принадлежит классу $C^2(R^n)$ и обладает свойством

$$y^T f''(x) y \geq m|y|^2, \quad m > 0, \tag{12}$$

для всех $x, y \in R^n$. Кроме того, из описания алгоритма ясно, что для порождаемых им точек x_k, $k=0,1,\ldots$, выполняются неравенства

$$f(x_{k+1}) \leq f(\bar{x}_{k,l+1}) \leq f(\bar{x}_{k,l}) \leq f(x_k) \tag{13}$$

при $0 \leq l \leq n-1$. Так как лебеговы множества функции f, обладающей свойством (12), ограничены, то из (13) следует, что последовательность порождаемых методом точек $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ целиком содержится в компакте $K \subseteq R^n$, определяемом формулой

$$K = \{x \in R^n : f(x) \leq f(x_0)\}. \tag{14}$$

Поэтому существует положительная константа $M > m$ такая, что для всех $x \in K$ и $y \in R^n$ выполнено соотношение

$$y^T f''(x) y \le M|y|^2. \qquad (15)$$

Теперь легко доказать корректность формулы пересчета (10). В самом деле, предположим для каких-нибудь $\ell < n$, что матрица $\tilde{H}_{\ell+1}^{-1}$ положительно-определенная. Тогда ясно, что знаменатель второго слагаемого в (10) отличен от нуля, так как вектор $\gamma_{\ell+1}$ не может быть нулевым. Действительно, если бы вектор

$$\gamma_{\ell+1} = P_{\ell+1}^T f''_{cp} z_{\ell+1}$$

был нулевым, то получили бы цепочку

$$0 = (z_{\ell+1}^T P_{\ell+1}) P_{\ell+1}^T f''_{cp} z_{\ell+1} = z_{\ell+1}^T f''_{cp} z_{\ell+1},$$

противоречащую (12). (Здесь $f''_{cp} = f''(x_{cp})$, $x_{cp} = \theta \bar{x}_{k,\ell+1} + (1-\theta)\bar{x}_{k,\ell}$, $0<\theta<1$.) Точно так же показывается, что и в третьем слагаемом (10) знаменатель отличен от нуля:

$$\gamma_{\ell+1}^T u_{\ell+1} = z_{\ell+1}^T f''_{cp} P_{\ell+1} P_{\ell+1}^T z_{\ell+1} = z_{\ell+1}^T f''_{cp} z_{\ell+1} > 0.$$

Далее, стандартным рассуждением легко установить, что полученная матрица $H_{\ell+1}^{-1}$ будет положительно-определенной. Теперь можно отбросить предположение о положительной определенности матрицы $\tilde{H}_{\ell+1}^{-1}$, так как это свойство показывается непосредственно. В самом деле, при $\ell=0$ матрица $\tilde{H}_{\ell+1}^{-1}$ есть единичная (1×1)-матрица. В таком случае, как установлено выше, положительно-определенной будет и матрица $H_{\ell+1}^{-1} \equiv H_1^{-1}$, а значит, этим же свойством обладает (2×2)-матрица

$$\tilde{H}_2^{-1} = \begin{pmatrix} H_1^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и так далее. Таким образом, формулы метода раздельных шагов полностью обоснованы.

Так как $(k+1)$-й шаг метода раздельных шагов заканчивается градиентным сдвигом

$$x_{k+1} = \bar{x}_{k,\ell} - \alpha_k f'(\bar{x}_{k,\ell}),$$

причем выполнено

$$f(x_{k+1}) \le f(\bar{x}_{k,\ell}) - \alpha_k q \cdot |f'(\bar{x}_{k,\ell})|^2,$$

то точно так же, как в [1] , здесь можно показать, что

$$\alpha_k |f'(\bar{x}_{k,\ell})| \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{16}$$

Отсюда легко следует сходимость изложенного варианта метода раздельных шагов. В самом деле,

$$|f'(x_{k+1})|^2 \le |f'(x_{k+1})| |f'(\bar{x}_{k,\ell})| + \alpha_k |[f'(x_{k+1})]^T f''_{cp} f'(\bar{x}_{k,\ell})| \le$$

$$\le |f'(x_{k+1})| \cdot |f'(\bar{x}_{k,\ell})| + \alpha_k M \cdot |f'(x_{k+1})| \cdot |f'(\bar{x}_{k,\ell})|.$$

Поэтому

$$|f'(x_{k+1})| \le |f'(\bar{x}_{k,\ell})| + \alpha_k \cdot M \cdot |f'(\bar{x}_{k,\ell})| \to 0$$

при $k\to\infty$ в силу (16), так как величины α_k ограничены снизу. (Как установлено в [1], выполняются неравенства $\alpha_k \ge \bar{\alpha} = \frac{1-q}{M}$.)

Таким образом, для любой предельной точки $\tilde{x}$ последовательности $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ получаем, ввиду непрерывности отображения $x \mapsto f'(x)$, соотношение $f'(\tilde{x}) = 0$. А это означает, что $\tilde{x}$ совпадает с x^* -решением исходной задачи (1).

Установим оценку скорости сходимости точек x_k к x^* в случае квадратичности функции цели f. Именно, не ограничивая общности, будем считать, что

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T \mathcal{D} x,$$

где $\mathcal{D}$ – вещественная симметричная положительно-определенная матрица размером $n \times n$, причем для всех x из R^n выполняются неравенства

$$M |x|^2 \ge x^T \mathcal{D} x \ge m |x|^2,$$

где $M > m > 0$ – наибольшее и наименьшее собственные числа матрицы $\mathcal{D}$. Здесь $x^* = (0,0,\dots,0)$.

Очевидно, что метод раздельных шагов может быть применен к минимизации таких функций, которые не обладают ярко выраженной овражностью (достаточно выбрать параметр S больше величины M, и никаких сингулярных направлений выделяться не будет). Тогда метод будет сходиться со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем $\sigma = \frac{M-m}{M+m}$.

Но в случае овражности функции цели f, т.е. если $M \gg m$, величина σ может быть очень близкой к единице, ухудшая тем самым оценку. Здесь получим для метода раздельных шагов оценку скорости сходимости, которая может быть в случае овражности функции цели значительно лучше обычной оценки для градиентных методов.

Прежде всего, нетрудно установить, что в случае квадратичной целевой функции f' матрицы H_l^{-1}, вычисляемые по формуле (10), имеют вид

$$H_l^{-1} = [\mathbb{P}_l^T \mathcal{D} \mathbb{P}_l]^{-1}, \quad 1 \le l \le n, \tag{17}$$

а матрицы $\mathbb{P}_{l,d}$ имеют вид

$$\mathbb{P}_{l,d} = \mathcal{D} \mathbb{P}_l, \quad 1 \le l \le n. \tag{18}$$

Далее, легко понять, что всегда после сдвига по несингулярным направлениям вида (2) или (6) оказываемся в точке минимума целевой функции f на подпространстве $\mathcal{L}_l$, натянутом на имеющиеся к данному моменту сингулярные направления. Другими словами,

$$\mathbb{P}_l^T f'(\bar{x}_{k,l}) = 0,$$

если сделаем шаг вида (2), и

$$\mathbb{P}_{l+1}^T f'(\bar{x}_{k,l+1}) = 0,$$

если сделаем шаг вида (6). Поэтому $(k+1)$-й шаг метода завершается одним из двух исходов. Во-первых, может случиться, что наберем n сингулярных направлений. В этом случае, как только что показано, попадем в точку x^* -решение задачи (I). Во-вторых, можем завершить $(k+1)$-й шаг сдвигом из точки $\bar{x}_{k,l}$ по направлению антиградиента $-f'(\bar{x}_{k,l})$ раньше, чем наберем n сингулярных направлений. Ясно, что это произойдет, если величина второй производной функции цели по направлению $f'(\bar{x}_{k,l})$ окажется не больше, чем S, т.е. если

$$\frac{1}{|f'(\bar{x}_{k,l})|^2} \cdot [f'(\bar{x}_{k,l})]^T \mathcal{D} f'(\bar{x}_{k,l}) = Y \le S.$$

Будем считать, что мы сдвигаемся по направлению $-f'(\bar{x}_{k,l})$ до минимума, т.е.

и
$$x_{k+1} = \bar{x}_{k,l} - \alpha_{k+1} f'(\bar{x}_{k,l})$$

$$\alpha_{k+1} = \arg\min_{\alpha \in R} f(\bar{x}_{k,l} - \alpha f'(\bar{x}_{k,l})).$$

Тогда легко видеть, что

$$\alpha_{k+1} = \frac{\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}^2 \bar{x}_{k,l}}{\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}^3 \bar{x}_{k,l}} . \tag{19}$$

Чтобы получить оценку скорости сходимости метода, сравним значение $f(x_{k+1})$ со значением $f(\bar{x}_{k,l})$, которое, в силу (I3), не превосходит $f(x_k)$. Другими словами, будем искать максимум величины

$$x_{k+1}^T \mathcal{D} x_{k+1} = (\bar{x}_{k,l}^T - \alpha_{k+1} \bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}) \mathcal{D} (\bar{x}_{k,l} - \alpha_{k+1} \mathcal{D} \bar{x}_{k,l}),$$

которую с учетом (I8) можно представить в виде

$$\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D} \bar{x}_{k,l} - \frac{(\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}^2 \bar{x}_{k,l})^2}{\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}^3 \bar{x}_{k,l}} \tag{20}$$

при ограничениях

$$\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D}^3 \bar{x}_{k,l} \le S \cdot \bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D} \bar{x}_{k,l}, \tag{21}$$

$$\bar{x}_{k,l}^T \mathcal{D} \bar{x}_{k,l} \le 1. \tag{22}$$

Сделаем замену переменных $y_k = \mathcal{D}^{1/2} \bar{x}_{k,l}$, где $(\mathcal{D}^{1/2})^2 = \mathcal{D}$. Тогда задача (20)-(22) перепишется в виде

$$\Phi(y_k) \equiv y_k^T y_k - \frac{(y_k^T \mathcal{D} y_k)^2}{y_k^T \mathcal{D}^2 y_k} \to max, \tag{20'}$$

$$y_k^T \mathcal{D}^2 y_k \le S \cdot y_k^T \mathcal{D} y_k , \tag{21'}$$

$$y_k^T y_k \le 1. \tag{22'}$$

Так как собственные числа матрицы $\mathcal{D}$ лежат в отрезке $[m, M]$, то решение задачи (20')-(22') нам известно из [I]. Именно, оптимальное значение целевой функции $\Phi(y_k)$ равно

$$\Phi^* = \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2 \qquad , \text{если } S > \frac{M+m}{2} ,$$

и

$$\Phi^* = \frac{(M-S)(S-m)}{S(M+m-S)}, \text{ если } m < S < \frac{M+m}{2}.$$

Таким образом, справедлива

ТЕОРЕМА. Последовательность точек x_k, $k=0,1,\ldots$, порождаемых изложенным вариантом метода раздельных шагов, сходится к точке x^* – решению задачи (I) с квадратичной целевой функцией f со скоростью геометрической прогрессии, знаменатель которой σ_* равен

$$\sigma = \frac{M-m}{M+m}, \text{ если } S = \frac{M+m}{2},$$

и

$$\sigma_* = \left[\frac{(M-S)(S-m)}{S(M+m-S)}\right]^{1/2}, \text{ если } m < S < \frac{M+m}{2}.$$

Если $S < m$, то $\sigma_* = 0$, т.е. решение достигается за один шаг.

ЗАМЕЧАНИЕ. Из теоремы видно, что чем ближе константа S к значению m, тем быстрее сходится метод, но при этом возрастает трудоемкость отдельного шага, так как может выделяться больше сингулярных направлений. Варьируя величину S, можно управлять процессом счета конкретной задачи.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Из всего вышеизложенного вытекает, что применение метода раздельных шагов тем более оправдано, чем более овражной является целевая функция f. Метод специально нацелен на случай, когда f является иерархически овражной, т.е. когда $M \gg \lambda_2(f'') \gg \cdots \gg m$. (Функции такого рода используются в [4].) В самом деле, в этом случае выделяемые сингулярные направления $p_1, p_2, \ldots, p_\ell$ очень близки к собственным векторам $u_1, u_2, \ldots, u_\ell$ матрицы f'', соответствующим собственным числам $M, \lambda_2(f''), \ldots, \lambda_\ell(f'')$. Поэтому в подпространстве, натянутом на сингулярные направления, квазиньютоновские сдвиги быстро приводят к точке минимума в этом подпространстве.

§3. Регулирование числа накапливаемых сингулярных направлений

Как уже отмечалось, метод ориентирован на тот случай, когда подпространство овражности целевой функции имеет небольшую по сравнению с n размерность N. Поэтому нежелательно, чтобы число работающих сингулярных направлений превышало N. Тогда мы будем достигать большой экономии вычислений по сравнению с квазиньютоновскими методами, сохраняя при этом более высокую скорость сходимости по сравнению с градиентными методами.

Первым шагом по пути экономии вычислений является сохранение сингулярных направлений, накопленных на предыдущем шаге, на следующий шаг метода, если это позволяет делать следующий критерий. После окончания $(k+1)$-го шага вычисляем отношение

$$\theta_k = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

и сравниваем его с имеющимся параметром τ_k, который на первом шаге получает значение $\tau_0 = 1$. Если $\theta_k \leq \omega \cdot \tau_k$, где $\omega \geq 1$ – заранее выбранное число, то накопленные сингулярные направления (если их число не превышает N) сохранятся на следующий $(k+2)$-й шаг. Выполнение обратного неравенства $\theta_k > \omega \cdot \tau_k$ служит основанием для исключения всех или одного сингулярного направления, если они имеются. Пересчет параметра τ_{k+1} производится по формуле

$$\tau_{k+1} = [(\tau_k)^k \cdot \theta_k]^{1/(k+1)},$$

т.е. τ_{k+1} есть среднее геометрическое величин $1, \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_k$. В численных экспериментах проводилось периодическое "обновление" величины τ_k, т.е. на шагах с некоторыми номерами k_j полагаем $\tau_{k_j+1} = \theta_{k_j}$, "забывая" о предыдущих θ_k. При этом соответственно модифицировалась формула пересчета τ_{k+1} на последующих шагах. Для исключения одного сингулярного направления применялась следующая процедура. Так как после нахождения сингулярных направлений $p_1, p_2, \ldots, p_l$ интерес представляют не они сами, а натянутое на них подпространство $\mathcal{L}_l$, то мы сначала серией преобразований отражения в этом подпространстве приводим [5] матрицу H_l^{-1} к трехдиагональному виду:

$$T_\ell = Q_\ell^T H_\ell^{-1} Q_\ell = \begin{bmatrix} d_1 & c_1 & & & & & 0 \\ c_2 & d_2 & c_3 & & & & \\ & c_3 & d_3 & c_4 & & & \\ & & c_4 & d_4 & c_5 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & \ddots & d_{\ell-1} & c_\ell \\ & & & & & c_\ell & d_\ell \end{bmatrix}$$

Здесь Q_ℓ - ортогональная матрица. Затем, снова пользуясь техникой [5], находим приближенно наибольшее собственное значение матрицы T_ℓ, которое является одновременно наибольшим собственным значением $\lambda_{max}(H_\ell^{-1})$ матрицы H_ℓ^{-1}. Вычислим приближенно

$$\lambda_{min}(H_\ell) = \frac{1}{\lambda_{max}(H_\ell^{-1})} .$$

Предлагаются два способа регулирования числа сингулярных направлений.

I СПОСОБ. Сравним $\lambda_{min}(H_\ell)$ с величиной $\mu \cdot S$, где $0<\mu<1$. Если $\lambda_{min}(H_\ell) \geqslant \mu \cdot S$, то сохраняем все сингулярные направления. Если нет, то избавляемся от одного сингулярного направления так, как показано ниже.

2 СПОСОБ. Если число ℓ сингулярных направлений превысило допустимое число N, то избавляемся от одного сингулярного направления.

Для того чтобы избавиться от "наименее" сингулярного направления в $\mathcal{L}_\ell$, поступаем следующим образом.

I^0. Решая вырожденную систему линейных уравнений

$$(T_\ell - \lambda_\ell E_\ell) u_\ell = 0 ,$$

найдем вектор $u_\ell \in R^\ell$ - собственный вектор матрицы T_ℓ, соответствующий

$$\lambda_\ell = \lambda_{max}(H_\ell^{-1}).$$

Так как

$$T_l = Q_l^T H_l^{-1} Q_l,$$

то получаем, что вектор

$$v_l = Q_l u_l$$

является собственным для H_l^{-1} со значением λ_l.

2^0. Удалим из матрицы Q_l столбец с таким номером j_0, что

$$|(u_l)_{j_0}| = \max_{1 \leq j \leq l} |(u_l)_j|.$$

Пусть, для определенности, $j_0 = 1$. Очевидно, что остальные столбцы Q_l вместе со столбцом $v_l = Q_l u_l$ образуют базис в R^l. Ортогонализуем эту систему векторов стандартной процедурой, беря в качестве первого вектора v_l, и затем нормируем все получившиеся векторы $v_1, v_2, \ldots, v_l$. Составленная из этих столбцов матрица

$$\bar{Q}_l = [v_1, v_2, \ldots, v_l]$$

будет ортогональной, а матрица

$$V_l = \bar{Q}_l^T H_l^{-1} \bar{Q}_l,$$

если бы все вычисления проводились точно, имела бы вид

$$V_l = \left(\begin{array}{c|c} V_{l-1} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \\ \hline \underbrace{0 \ldots 0}_{l-1} & \lambda_l \end{array} \right) \Big\} l-1$$

Поэтому в качестве новой матрицы уменьшенного размера H_{l-1}^{-1} примем $(l-1) \times (l-1)$–матрицу V_{l-1}, а новыми сингулярными направлениями будут первые $(l-1)$ столбцов матрицы

$$\bar{P}_l = P_l \bar{Q}_l.$$

Наконец, определим матрицу $P_{l-1,d}$, взяв первые $(l-1)$ столбцов матрицы

$$\bar{P}_{l,d} = P_{l,d} \cdot \bar{Q}_l.$$

Теперь все готово для начала следующего шага метода.

§4. Приложение

Работа метода раздельных шагов использовалась на тестовых функциях трех видов:

а) овражных тестовых функциях четырех переменных, взятых из работы [2];

б) иерархически овражных функциях;

в) функциях с "размазанным" минимумом (это функции типа ℓ_p - норм

$$|x|_p = \left(\sum_{j=1}^{n} |x_j|^p\right)^{1/p}, \quad p > 1).$$

Функции групп б) и в) возникают, например, в [4]. Забегая вперед, отметим, что в статье приведены результаты работы метода лишь на функциях группы а). Эти данные помещены в табл. I-5, в которых приняты следующие обозначения:

k - число шагов, которое потребовалось для достижения заданной точности;

x_0 - начальное приближенное решение;

x_k - конечное приближенное решение;

x_* - точное решение;

d_H - норма градиента в начальной точке $|f'(x_0)|$;

d_k - норма градиента в конечной точке $|f'(x_k)|$;

N - общее число вычислений функции и градиента за время работы метода;

α - коэффициент растяжения пространства в методе Н.З.Шора [2];

L - число сингулярных направлений, выделявшихся на большинстве шагов метода.

Метод раздельных шагов хорошо работает на функциях группы б) и в). Кроме того, как показал опыт расчетов для функций группы а), метод раздельных шагов и на обычных овражных функциях вполне может конкурировать с методом Н.З.Шора. Так как условия счета этими двумя методами были различны, то проводим их сравнения в табл. I-5 по показателю

$$æ = N/(\lg d_H - \lg d_k),$$

отражающему средние затраты вычислений функции и градиента для понижения нормы градиента на один порядок. Кроме того, в табл. I–4 даются результаты расчетов для варианта метода раздельных шагов, описанного ранее [I]. Этот вариант обозначен буквой А, а изложенный здесь вариант – буквой Б. В табл. 5 все результаты даны для варианта Б.

Прежде чем перейти к описанию экспериментального материала, отметим особенности реализации алгоритма, которые не уточнялись ранее.

I) Во избежание переполнения разрядной сетки ЭВМ первоначальная длина шага α_0 в сдвиге по антиградиенту $-f'(x_k)$ выбиралась равной

$$\alpha_0 = \min\left\{ t, \ \frac{1+|f(x_k)|}{|f'(x_k)|^2} \right\},$$

где параметр τ варьировался в широких пределах.

2) Величина барьера S, участвующего в критерии выделения сингулярных направлений, задавалась формулой

$$S = c(1-q)/\alpha_0,$$

где q варьировалось от 0,4 до 0,5, а c – от 2 до 20.

3) Поиск точки

$$\bar{x}_{k,\ell+1} = \bar{x}_{k,\ell} + \beta_k x_{\ell+1}$$

при сдвиге по сингулярным направлениям осуществлялся методом золотого сечения [6, гл.6, §8.5].

4) В критерии аннулирования сингулярных направлений (см. §3) параметр ω варьировался от 2,0 до 5,0.

Наконец, отметим, что в ряде экспериментов проводилось регулирование числа сингулярных направлений. Именно, в процессе работы метода не разрешалось выделять больше двух сингулярных направлений. Эксперименты показали наряду с некоторым замедлением скорости сходимости существенную экономию вычислений при таком регулировании.

В табл. I–5 приведены результаты счета следующих овражных функций [2].

ПРИМЕР I. $f(x)=(x_1+10x_2)^2+5(x_3-x_4)^2+(x_2-2x_3)^4+10(x_1-x_4)^4$.
Начальное приближение x_0 =(I0,I0,I0,–I0). Точка минимума x_* =(0,0,0,0), $f(x_*)=0$.

ПРИМЕР 2. $f(x)=(e^{x_1}-x_2)^4+100(x_2-x_3)^6+th^4(x_3-x_4)+x_1^8+(x_4-1)^2$.
Начальное приближение x_0 =(I,2,2,2). Точка минимума x_* =

$=(0,I,I,I)$, $f(x_*)=0$.

ПРИМЕР 3. $f(x)=\sum_{i=1}^{10}(e^{-0,2i}+2e^{-0,4i}-x_1e^{-0,2x_2 i}-x_3e^{-0,1x_4 i})^2$.
Начальное приближение $x_0=(0,0,0,0)$. Точка минимума $x_* =$
$=(I,I,2,I)$, $f(x_*)=0$.

ПРИМЕР 4. $f(x)=100(x_1^2-x_2)^2+(x_1-x_2)^2+(x_1-1)^2+90(x_3^2-x_4)^2+$
$+(x_3-1)^2+10,1[(x_2-1)^2+(x_4-1)^2]+19,8(x_2-1)(x_4-1)$.
Начальное приближение $x_0=(-3,-I,-3,-I)$. Точка минимума $x_* =$
(I,I,I,I), $f(x_*)=0$.

ПРИМЕР 5. $f(x)=10^{-3}\sum_{i=1}^{10}(10^3e^{-0,2i}+2\cdot 10^3e^{-0,4i}-$
$-x_1e^{-0,2x_2 i}-x_3e^{-0,2x_4 i})^2$.
Начальное приближение $x_0=(500,0,2500,3)$. Точка минимума $x_* =$
$=(1000,I,2000,2)$, $f(x_*)=0$.

Автор выражает глубокую благодарность В.А.Булавскому за научное руководство.

ЛИТЕРАТУРА

I. КАЛАШНИКОВ В.В. Метод раздельных шагов для минимизации овражных функций. – Оптимизация, 1970, вып. 25, с.70–85.
2. ШОР Н.З., ЖУРБЕНКО Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространств в направлении разности двух последовательных градиентов. – Кибернетика, 1971, № 3, с.51–59.
3. Численные методы условной минимизации /Сб. статей. Пер. с англ. – М.: Мир, 1977.
4. КАЛАШНИКОВ В.В. Некоторые задачи лексикографической минимизации. – Оптимизация, 1978, вып. 21, с.109–120.
5. ГОДУНОВ С.К. Решение систем линейных уравнений. – Новосибирск: Наука, 1980.
6. КАРМАНОВ В.Г. Математическое программирование. – М.: Наука, 1975.

Поступила в ред.-изд. отдел
15.07.1981 г.

Таблица I (пример I)

	Метод Н.З.Шора		Вариант А	Вариант Б
	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$		
k	46	50	33	8
$d_н$	$0{,}52 \cdot 10^{6}$	$0{,}52 \cdot 10^{6}$	$0{,}52 \cdot 10^{6}$	$0{,}52 \cdot 10^{6}$
d_k	$0{,}30 \cdot 10^{-5}$	$0{,}11 \cdot 10^{-4}$	$0{,}81 \cdot 10^{-3}$	$0{,}74 \cdot 10^{-3}$
N	506	745	345	346
L	–	–	1-2	2
$\varkappa$	45,02	69,79	39,17	39,11

Таблица 2 (пример 2)

	Метод Н.З.Шора		Вариант А	Вариант Б
	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$		
k	36	32	12	6
$d_н$	$0{,}12 \cdot 10^{2}$	$0{,}12 \cdot 10^{2}$	$0{,}12 \cdot 10^{2}$	$0{,}12 \cdot 10^{2}$
d_k	$0{,}48 \cdot 10^{-7}$	$0{,}25 \cdot 10^{-6}$	$0{,}31 \cdot 10^{-3}$	$0{,}29 \cdot 10^{-3}$
N	184	154	100	121
L	–	–	1	1
$\varkappa$	21,91	20,05	21,80	29,30

Таблица 3 (пример 3)

k	83	90	13	22
$d_н$	$0{,}24 \cdot 10^{2}$	$0{,}24 \cdot 10^{2}$	$0{,}24 \cdot 10^{2}$	$0{,}24 \cdot 10^{2}$
d_k	$0{,}28 \cdot 10^{-7}$	$0{,}35 \cdot 10^{-7}$	$0{,}31 \cdot 10^{-3}$	$0{,}86 \cdot 10^{-4}$
N	482	513	131	250
L	–	–	1-2	1
$\varkappa$	53,96	58,06	26,80	45,90

Таблица 4 (пример 4)

k	99	76	73	14
$d_н$	$0{,}17 \cdot 10^{5}$	$0{,}17 \cdot 10^{5}$	$0{,}17 \cdot 10^{5}$	$0{,}17 \cdot 10^{5}$
d_k	$0{,}21 \cdot 10^{-4}$	$0{,}4 \cdot 10^{-4}$	$0{,}73 \cdot 10^{-3}$	$0{,}22 \cdot 10^{-3}$
N	540	600	541	332
L	–	–	1-2	2-3
$\varkappa$	60,62	69,54	73,43	42,09

Таблица 5 (пример 5)

	Метод Н.З.Шора		Вариант Б	
	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$		
k	100	72	15	21
$d_н$	$0{,}154 \cdot 10^{4}$	$0{,}154 \cdot 10^{4}$	$0{,}154 \cdot 10^{4}$	$0{,}154 \cdot 10^{4}$
d_k	$0{,}86 \cdot 10^{-6}$	$0{,}45 \cdot 10^{-6}$	$0{,}80 \cdot 10^{-2}$	$0{,}61 \cdot 10^{-3}$
N	530	483	85	330
L	–	–	1	1-2
$\varkappa$	57,28	50,66	16,08	51,54