





دانشکده علوم پایه

گروه ریاضی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته ریاضی کاربردی گرایش تحقیق در عملیات

عنوان:

روش های تصویر سه جمله ای بدون مشتق برای حل دستگاه معادلات غیر خطی یکنوا

استاد راهنما:

دکتر کیوان امینی

نگارش:

فرناز محمدصادقی

دی ۱۳۹۹

چکیده

دستگاه معادلات غیرخطی یکی از مسائل مهم و پرکاربرد در ریاضیات است. روش‌های متفاوتی برای حل این مسائل تاکنون ارائه شده است. از میان روش‌های تکراری برای حل این مسائل، می‌توان به روش نیوتون، روش‌های شبه‌نیوتن و نسخه‌های تغییر یافته آن‌ها اشاره کرد. یکی از نقاط ضعف مهم این روش‌ها بخصوص برای مسائل با ابعاد بزرگ، نیاز به محاسبه ماتریس ژاکوبی در هر تکرار و حل دستگاه معادلات خطی متناظر است. تلاش برای ارائه روش‌های بدون ژاکوبی برای حل دستگاه‌های معادلات غیرخطی در سال‌های اخیر همواره مورد توجه محققان بوده است. در حالات خاص که دستگاه معادلات دارای خواص ویژه می‌باشد، الگوریتم‌های بسیار موثری معرفی شده‌اند. یکی از این رده‌های خاص، دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا می‌باشد که روش‌های حل متفاوتی برای آن ارائه شده است. یکی از مهمترین رده‌های موجود برای حل این مسائل، الگوریتم‌های مبتنی بر تصویر است که بواسطه نیاز به حافظه کم، در حل دستگاه معادلات غیرخطی مقیاس بزرگ یکنوا کاربردهای زیادی دارند.

هدف این پایان‌نامه، ارائه دو خانواده جدید از الگوریتم‌های بدون مشتق مبتنی بر تصویر است که از جهاتی شبیه جهات گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای استفاده می‌کنند جاییکه ثابت می‌شود جهات تعریف شده در شرایط کاهش کافی صدق می‌کنند. نتایج عددی به دست آمده نشان می‌دهد که این روش‌ها برای حل این نوع از مسائل موثر و کارا هستند.

کلمات کلیدی:

دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا، روش‌های مبتنی بر تصویر، الگوریتم‌های بدون مشتق، روش‌های گرادیان مزدوج، همگرایی سراسری.

فهرست مطالب

| صفحه | عنوان |
|------|---|
| ۹ | فصل اول: دستگاه معادلات غیر خطی |
| ۱۰ | ۱-۱ مقدمه |
| ۱۰ | ۲-۱ روش های تکراری برای حل دستگاه معادلات غیر خطی |
| ۱۱ | ۳-۱ روش های مستقیم |
| ۱۲ | ۱-۳-۱ روش نیوتن |
| ۱۳ | ۲-۳-۱ روش نیوتن غیر دقیق |
| ۱۴ | ۳-۳-۱ روش برویدن |
| ۱۶ | فصل دوم: مقدمه ای بر بهینه سازی غیر خطی |
| ۱۷ | ۱-۲ مقدمه |
| ۱۷ | ۲-۲ بهینه سازی نامقید |
| ۱۷ | ۳-۲ الگوریتم های بهینه سازی |
| ۲۲ | ۴-۲ الگوریتم های کاهش برای بهینه سازی نامقید |
| ۲۴ | ۱-۴-۲ روش تندترین کاهش |
| ۲۵ | ۲-۴-۲ روش نیوتن |
| ۲۷ | ۳-۴-۲ روش شبه نیوتن |
| ۳۱ | ۱-۳-۴-۲ روش برویدن_فلچر_گلدفارب_شانو (BFGC) |
| ۳۴ | ۵-۲ روش BFGS بدون حافظه |
| ۳۵ | ۶-۲ بررسی دو خانواده از روش های سکانت اصلاح شده |
| ۳۵ | ۱-۶-۲ روش سکانت اصلاح شده لی و فکوشیما |
| ۳۶ | ۲-۶-۲ روش سکانت اصلاح شده ژو و ژانگ |
| ۳۷ | فصل سوم: روش گرادیان مزدوج |

| | |
|-----------|--|
| ۳۷ | ۱-۳ مقدمه |
| ۳۸ | ۲-۳ روش گرادیان مزدوج (CG) |
| ۴۲ | ۳-۳ روش گرادیان مزدوج غیرخطی |
| ۴۲ | ۱-۳-۳ روش گرادیان مزدوج فلچر-ریوز (FR) |
| ۴۴ | ۲-۳-۳ روش گرادیان مزدوج پولاک-ریپر-پولیاک (PRP) |
| ۴۵ | ۳-۳-۳ روش گرادیان مزدوج هستنس-استفل (HS) |
| ۴۶ | ۴-۳ روش‌های گرادیان مزدوج مبتنی بر شرایط سکانت |
| ۴۶ | ۱-۴-۳ روش گرادیان مزدوج دای-لیانو (DL) |
| ۴۸ | ۲-۴-۳ روش گرادیان مزدوج ژانگ-ژو (ZZ) |
| ۴۹ | ۵-۳ روش‌های گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای |
| ۵۳ | فصل چهارم: یک روش بدون مشتق مبتنی بر تصویر سه‌جمله‌ای |
| ۵۴ | ۱-۴ مقدمه |
| ۵۵ | ۲-۴ روش‌های مبتنی بر تصویر |
| ۵۷ | ۳-۴ الگوریتم مبتنی بر تصویر استفاده کننده از یک جهت گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای (TTDFP) |
| ۶۰ | ۱-۳-۴ همگرایی سراسری |
| ۶۵ | فصل پنجم: یک روش بدون مشتق مبتنی بر تصویر سه‌جمله‌ای طیفی |
| ۶۶ | ۱-۵ مقدمه |
| ۶۶ | ۲-۵ روش‌های گرادیان مزدوج طیفی |
| ۶۶ | ۳-۵ یک جهت گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای طیفی |
| ۶۹ | ۴-۵ الگوریتم مبتنی بر تصویر استفاده کننده از یک جهت گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای طیفی |
| ۷۳ | ۱-۴-۵ همگرایی سراسری |
| ۷۷ | فصل ششم: نتایج عددی |
| ۷۸ | ۱-۶ مقدمه |
| ۷۹ | ۲-۶ بررسی نتایج عددی |

۸۵ منابع و مآخذ

۸۹ واژگان فارسی به انگلیسی

پیشگفتار

حل دستگاه معادلات غیرخطی یکی از مسائل مهم در ریاضی کاربردی است. روش نیوتن، روش‌های شبه‌نیوتن و نسخه‌های تغییر یافته آن‌ها به واسطه‌ی همگرایی سریع آن‌ها در میان روش‌های تکراری برای حل معادلات غیرخطی در زمره جذاب‌ترین روش‌ها هستند. نیاز به محاسبه ماتریس ژاکوبی و حل یک سیستم معادلات خطی از نقاط ضعف مهم این روش‌ها بخصوص در مورد مسائل با ابعاد بزرگ می‌باشد.

یک رده خاص و البته مهم از معادلات غیرخطی که کاربردهای مختلف در علوم و مهندسی دارد، معادلات غیرخطی یکنوا است. جاییکه تابع موجود یک تابع یکنواست. در این حالت حل مسئله تا حدود زیادی ساده‌تر می‌شود و می‌توان با استفاده از خواص این نوع از معادلات الگوریتم‌های کاراتری برای حل مسئله ارائه نمود. تا کنون روش‌های متعددی برای حل معادلات غیرخطی یکنوا پیشنهاد شده است. یک رده مهم از این روش‌ها که در سال‌های اخیر توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است رده روش‌های مبتنی بر تصویر است. در این روش‌ها در هر مرحله با تولید یک جهت مناسب، تولید یک ابرصفحه جداکننده و استفاده از فرآیند تصویر تکرار بعدی تولید می‌گردد. در این روش‌ها و در جهت اثبات خواص همگرایی مناسب معمولاً جهت تولید شده به گونه‌ای تولید می‌شود که مستقل از نوع جستجوی خطی استفاده شده در شرایطی مشابه با شرایط کاهش کافی صدق کنند. ایده اصلی روش‌های مبتنی بر تصویر یافتن یک ابرصفحه جداکننده تکرار جاری از مجموعه جواب دستگاه در هر مرحله و تولید تقریب جدید با تصویر تقریب قبلی بر ابرصفحه ساخته شده است.

با توجه به ساختار روش‌های مبتنی بر تصویر و نتایج عددی مرتبط با آن‌ها، بیشتر هزینه محاسباتی، بخصوص تعداد محاسبات توابع، در این روش‌ها مربوط به تولید ابرصفحه جداکننده می‌باشد، که خود وابسته به جهت انتخاب شده و چگونگی یافتن طول گام α_k است. بنابراین انتخاب جهت مناسب و استفاده از یک جستجوی خطی مناسب در کاهش هزینه‌های محاسباتی و افزایش کارایی روش‌های مبتنی بر تصویر می‌تواند بسیار موثر باشد. ایده‌های متفاوتی برای تولید جهات در این روش‌ها مورد بررسی قرار گرفته‌اند که یکی از مناسب‌ترین آن‌ها استفاده از فرآیند مشابه با فرآیند ساخت جهات گرادیان مزدوج می‌باشد که سبب تولید نتایج تئوری و عددی مطلوب می‌گردد. هدف این پایان‌نامه معرفی دو جهت از نوع گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای و ارائه دو الگوریتم مبتنی بر تصویر بر مبنای جهات تولید شده می‌باشد این پایان‌نامه در شش فصل به شرح زیر تهیه شده است.

در فصل اول دستگاه معادلات غیرخطی و روش‌های مستقیم به‌طور مختصر مطرح می‌گردد.

در فصل دوم به بیان مقدمات، تعاریف لازم و برخی از روش‌های تکراری برای حل مسائل بهینه‌سازی نامقید که ارتباط مستقیمی با روش‌های حل معادلات غیرخطی دارند، پرداخته می‌شود.

در فصل سوم روش‌های گرادیان مزدوج به‌طور مختصر مورد بررسی قرار می‌گیرد و برخی جهات گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای مورد بررسی قرار می‌گیرند.

در فصل چهارم پس از بیان ایده اصلی روش‌های مبتنی بر تصویر، با استفاده از جهت گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای مطرح شده در فصل قبل، یک روش مبتنی بر تصویر جدید برای حل معادلات غیرخطی یکنوا معرفی می‌گردد. بررسی خواص همگرایی این روش از اهداف دیگر این فصل است.

در فصل پنجم و با ایده‌ای مشابه با فصل قبل و استفاده از یک جهت گرادیان مزدوج طیفی سه‌جمله‌ای، یک روش مبتنی بر تصویر سه‌جمله‌ای طیفی برای حل معادلات غیرخطی یکنوا ارائه می‌گردد.

در فصل ششم با ارائه برخی نتایج عددی مرتبط با الگوریتم‌های ارائه شده، کارایی و مؤثر بودن الگوریتم‌های ارائه شده مورد آزمون قرار می‌گیرد.

فصل اول
دستگاه معادلات غیر خطی

در حالت کلی دستگاه معادلات غیرخطی به صورت زیر است

$$F(x) = 0, \quad (1-1)$$

که در آن $F: R^n \rightarrow R^n$ یک تابع برداری به صورت زیر می باشد

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}.$$

جاییکه $x \in R^n$ بردار شامل متغیرهای مجهول می باشد. اگر توابع $f_j(x)$ همگی توابع خطی باشند، دستگاه معادلات یک دستگاه خطی نامیده می شود. روش های دقیق بسیاری برای حل معادلات خطی وجود دارد، اما بیشتر مسائل حقیقی دنیای واقعی به صورت غیرخطی هستند، که حل آنها بسیار دشوارتر از نوع خطی می باشند. حل یک دستگاه معادلات غیرخطی بطور کلی نیاز به نوعی از روش های تکراری دارد.

۱-۲ روش های تکراری برای حل دستگاه معادلات غیرخطی

از آنجا که روش های تکراری اغلب شامل استفاده از دنباله ها می باشند، ابتدا مرتبه ی همگرایی دنباله ها را بیان می کنیم.

تعریف ۱-۲-۱: [16] فرض کنید $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ یک دنباله در R^n همگرا به x^* باشد.

الف) همگرایی دنباله فوق را Q -خطی گویند هرگاه یک ثابت مثبت $r \in (0,1)$ وجود داشته باشد بطوریکه برای هر k به اندازه کافی بزرگ داشته باشیم

$$\frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} \leq r,$$

این بدان معناست که در تکرار جاری فاصله جواب توسط یک عامل ثابت کاهش می یابد.

ب) همگرایی دنباله فوق Q -زیرخطی گویند هرگاه

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0.$$

ج) همگرایی دنباله فوق را Q -مجذوری گویند هرگاه ثابت M موجود باشد بطوریکه برای $k \in N$ داشته باشیم

$$\frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^2} \leq M.$$

مثال ۱-۲-۱:

۱. دنباله $\{b^n\}$ ، $0 < b < 1$ بطور Q -خطی همگرا به صفر است.

۲. دنباله $\left\{\left(\frac{1}{n}\right)^n + 1\right\}$ بطور Q -زبر خطی همگرا به یک است.

۳. دنباله $\{b^{2^n}\}$ ، $0 < b < 1$ بطور Q -مجذوری همگرا به صفر است.

تعریف ۱-۲-۲: بردار x^* که در (۱-۱) صدق می‌کند یک جواب برای دستگاه معادلات غیر خطی (۱-۱) می‌نامند.

در حالت کلی دستگاه معادلات غیرخطی می‌تواند

- فاقد جواب باشد.
- دارای بینهایت جواب باشد.
- دارای یک جواب منحصر بفرد باشد.

تعریف ۱-۲-۳: ماتریس ژاکوبی دستگاه معادلات (۱-۱) همان ماتریس ژاکوبی تابع برداری می‌باشد که به صورت زیر قابل محاسبه است

$$J(x) = \nabla F(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

برای هر دو مسائل بهینه‌سازی و دستگاه معادلات غیرخطی، روش نیوتن در سدر الگوریتم‌ها قرار دارد. روش‌هایی مانند جستجوی خطی، روش ناحیه اطمینان، روش‌های لونیبر-مارکوات، روش‌های شبه‌نیوتن و ... روش‌های پرکاربرد برای حل اینگونه مسائل هستند.

در این فصل روش نیوتن، روش نیوتن غیردقیق و روش برویدن که روش تکراری برای حل معادلات غیرخطی می‌باشند، مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۱-۳ روش‌های مستقیم

در روش‌های مستقیم الگوریتم @ها را مستقیماً روی مسئله (۱-۱) به کار می‌گیرند. در این قسمت به طور خلاصه روش‌های نیوتون، نیوتن غیردقیق و برویدن بررسی می‌گردد.

۱-۳-۱ روش نیوتن

به ندرت می‌توان یک دستگاه معادلات غیرخطی را به صورت جبری حل نمود و جواب دقیق آن را به دست آورد. بنابراین در بیشتر موارد از روش‌های تکراری برای تقریب جواب استفاده می‌گردد. از معروف‌ترین و قدیمی‌ترین روش‌ها روش نیوتن برای حل دستگاه معادلات غیرخطی می‌باشد. در روش نیوتن با داشتن تقریب اولیه x_0 و فرض مشتق‌پذیری F ، دنباله‌ای از تقریب‌های متوالی با استفاده از فرمول زیر به دست می‌آید

$$x_{k+1} = x_k + p_k^N, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (۳-۱)$$

که در آن P_k^N یک جهت جستجو می‌باشد، جهت P_k^N از حل دستگاه زیر به دست می‌آید

$$J_k P_k^N = -F_k, \quad (۴-۱)$$

که در آن $F_k = F(x_k)$ و $J_k = F'(x_k)$.

این روش خواص تئوری و عددی بسیار جالبی دارد. فرض کنید x_k جوابی برای مسئله (۱-۱) باشد، اگر $F'(x_k)$ نامنفرد و نقطه x_0 به اندازه کافی نزدیک x^* انتخاب گردد آنگاه دنباله $\{x_k\}$ تولید شده توسط رابطه (۳-۱) به‌طورزبرخطی به x^* همگراست و در حالتی که $F'(x_k)$ در یک همسایگی x^* مانند D پیوسته لیپ‌شیتز باشد، یعنی عدد $L > 0$ چنان وجود داشته باشد که برای هر $x, y \in D$ داشته باشیم:

$$\|F'(x) - F'(y)\| \leq L \|x - y\|.$$

همگرایی فوق از درجه دو می‌باشد. در مواردی که F خطی باشد روش نیوتن با هر نقطه‌ی آغازین در یک تکرار به جواب دقیق مسئله همگرا خواهد بود.

با توجه به مقدمات مطرح شده، چارچوب کلی الگوریتم نیوتن به صورت زیر می‌باشد.

| الگوریتم ۱-۱ (الگوریتم روش نیوتن) |
|---|
| ورودی: بردار آغازین x_0 و پارامتر دقت $\epsilon > 0$. |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$. |
| گام (۱): اگر $\ F_k\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت |
| $J_k P_k^N = -F_k$. |
| گام (۲): قرار ده $x_{k+1} = x_k + p_k^N$. |
| گام (۳): $k = k + 1$ و به گام (۱) برو. |

روش نیوتن علاوه بر نتایج عددی خوب و سرعت همگرایی بالا دارای معایبی می‌باشد که از مهمترین آن‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد.

- الگوریتم نیوتن همگرایی سراسری ندارد.

- در هر تکرار الگوریتم نیوتن با توجه به نیاز به محاسبه ماتریس J_k ، هزینه محاسباتی زیاد است.

- زمانی که نقطه شروع دور از جواب باشد الگوریتم نامنظم رفتار می کند و نتایج خوبی ندارد.

با توجه به مشکلات ذکر شده روش نیوتن با وجود سرعت همگرایی مناسب یک الگوریتم کارا نیست. بنابراین بسیاری از دانشمندان تلاش در جهت اصلاح مناسب روش نیوتن برای رفع مشکلات ذکر شده انجام داده اند. روش نیوتن با توجه به خاصیت همگرایی مناسب می تواند با اصلاحاتی روشی سریع برای حل دستگاه معادلات غیرخطی باشد و برای حل مسائل بیشتر ارتقا داده شود.

۱-۳-۲ روش نیوتن غیردقیق

روش نیوتن هنگامی که نقطه آغازین به اندازه کافی نزدیک به نقطه‌ی مینیمم باشد سرعت همگرایی مناسبی دارد. اما با توجه به مشکلات ذکر شده در بخش قبل، حل دستگاه معادلات غیرخطی و ...، در هر تکرار که تعداد مجهولات زیاد است به دست آوردن جواب پرهزینه خواهد بود و حتی محاسبه دقیق جهت نیوتن ممکن است کارایی لازم را نداشته باشد. بنابراین پیشنهاد شده است که دستگاه معادلات (۱-۱) از یک روش تقریبی به دست آید. روش های نیوتن غیردقیق در جهت فراهم کردن نتایج همگرایی مناسب به دنبال جواب تقریبی هستند که در رابطه زیر صدق کن

$$\|F_k + J_k P_k^N\| \leq \gamma_k \|F_k\|. \quad (5-1)$$

که $\gamma_k \in [0, \gamma]$ یک ثابت است. برای γ_k انتخاب های متفاوتی وجود دارد که الگوریتم های با خواص متفاوت تولید می کند.

با توجه به این توضیحات چارچوب کلی روش های نیوتن غیردقیق به صورت زیر است.

| الگوریتم ۱-۲ (الگوریتم روش نیوتن غیردقیق) |
|---|
| ورودی: بردار آغازین x_0 ، مقدار $\gamma \in [0, 1)$ و پارامتر دقت $\epsilon > 0$. |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$ و $x_k = x_0$. |
| گام (۱): اگر $\ F_k\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت پارامتر $\gamma_k \in [0, \gamma]$ را انتخاب کن. |
| گام (۲): جواب دستگاه (۴-۱) با شرط (۵-۱) پیدا کن. |
| گام (۳): قرار ده $x_{k+1} = x_k + P_k^N$. |
| گام (۴): $k = k + 1$ و به گام (۱) برو. |

قضیه زیر همگرایی موضعی را برای روش های نیوتن غیردقیق ارائه می دهد.

قضیه ۱-۳-۱ [17] فرض کنید تابع F در یک مجموعه محدب $D \in R^n$ به طور پیوسته مشتق پذیر باشد، همچنین فرض کنید که $x^* \in D$ یک جواب ناتباهیده از $F(x) = 0$ و دنباله $\{x_k\}$ توسط الگوریتم (۲-۱) تولید شده باشد. آنگاه اگر $x_k \in D$ به اندازه کافی نزدیک به x^* باشد موارد زیر برقرار است.

۱. اگر γ_k به اندازه کافی کوچک باشد، $\{x_k\}$ به x^* به صورت Q -خطی همگراست.
۲. اگر $\gamma_k \rightarrow 0$ ، آنگاه دنباله $\{x_k\}$ به x^* به صورت Q -زبرخطی همگراست.
۳. اگر J_k در یک همسایگی از x^* پیوسته لیپ شیتز باشد و $\gamma_k = O(\|F_k\|)$ ، آنگاه همگرایی روش Q -مجذوری است.

۱-۳-۳ روش برویدن

روش های تکراری برای حل دستگاه معادلات غیرخطی دارای هزینه محاسبات شامل هزینه محاسبه مقدار گرادیان و مقدار تابع هدف می باشد. لذا اگر محاسبه مقدار تابع برداری F پیچیده یا پرهزینه باشد، آنگاه محاسبه ی ماتریس ژاکوبی به همان مقدار پیچیده و یا پرهزینه است. با الهام گرفتن از روش های شبه نیوتن، دانشمندان ایده استفاده یک ماتریس تقریبی را بجای استفاده از ماتریس دقیق ژاکوبی را پیشنهاد دادند.

سال ۱۹۶۵ برویدن^۱ دسته ای از روش ها را برای حل دستگاه های معادلات غیرخطی ارائه کرد که این روش ها به روش های شبه نیوتن معروف هستند. روش های شبه نیوتن از یک تقریب اولیه ماتریس ژاکوبی، مانند B_0 ، شروع می کنند و با به کارگیری یک فرمول بهنگام مناسب، تقریب های بعدی ژاکوبی را تولید می کنند.

یکی از معروف ترین روش های شبه نیوتن، روش برویدن می باشد بطوریکه از فرمول رتبه یک زیر برای بهنگام ماتریس B_k استفاده می نماید.

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k) s_k^T}{\|s_k\|^2} \quad (۶-۱)$$

که در آن $s_k = x_{k+1} - x_k$ و $y_k = F_{k+1} - F_k$. به وضوح B_{k+1} به دست آمده از فرمول (۶-۱) در رابطه،

$$B_{k+1} s_k = y_k,$$

که به رابطه سکانت معروف است، صدق می نماید.

لم زیر بیانگر یکی دیگر از خواص جالب فرمول بهنگام (۶-۱) است که نشان می دهد در میان تمام ماتریس هایی که در رابطه سکانت صدق می کنند B_{k+1} تولید شده توسط این فرمول نزدیک ترین آن ها به B_k است.

¹ Broyden

لم ۱-۳-۱: در میان همه ماتریس‌های که در آن رابطه $BS_k = y_k$ صدق می‌کنند، B_{k+1} به دست آمده از (۶-۱) مقدار $\|B_k - B\|$ را مینیمم می‌کند.

اثبات: به [17] مراجعه شود.

باتوجه به مطالب بیان شده، روند کلی الگوریتم روش برویدن برای حل دستگاه معادلات غیرخطی به صورت زیر است.

| الگوریتم ۱-۳ (الگوریتم روش برویدن) |
|---|
| ورودی: تقریب اولیه x_0 ، ماتریس $B_0 \in R^{n \times n}$ و پارامتر دقت $\epsilon > 0$. |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$ و مقدار F_k را محاسبه کن. |
| گام (۱): اگر $\ F_k\ < \epsilon$ توقف کن. x_k جواب مسئله است. در غیر این صورت به گام (۲) برو. |
| گام (۲): جهت p_k را از حل دستگاه $B_k p_k = -F_k$ محاسبه کن. |
| گام (۳): قرار ده $x_{k+1} = x_k + p_k$ و B_{k+1} را از رابطه (۶-۱) محاسبه کن. |
| گام (۴): $k = k + 1$ و به گام (۱) برو. |

باتوجه به اینکه سرعت همگرایی روش برویدن از روش نیوتن کمتر است اما این روش کاربردهای عملی زیادی دارد. در قضیه زیر می‌بینیم که تحت شرایط خاصی روش برویدن به صورت موضعی دارای همگرایی زبرخطی می‌باشد.

قضیه ۱-۳-۲: (همگرایی روش برویدن) فرض کنید نگاشت F در مسئله (۱-۱) روی مجموعه $D \subset R^n$ به طور پیوسته مشتق پذیر باشد. همچنین فرض کنید $x^* \in R^n$ ، $\beta > 0$ و همسایگی $N \subset D$ از x^* وجود داشته باشد که $F(x^*) = 0$ ، $F'(x^*)^{-1}$ موجود و $\|F'(x^*)^{-1}\| \leq \beta$ و $F'(x)$ روی N پیوسته لپ‌شیتز باشد. آنگاه پارامترهای $\delta > 0$ و $\epsilon > 0$ وجود دارند بطوریکه اگر

$$\|x_0 - x^*\| \leq \epsilon, \quad \|B_0 - F'(x^*)\| \leq \delta. \quad (۷-۱)$$

آنگاه دنباله تولید شده توسط الگوریتم (۱-۳) به صورت Q -زبرخطی به x^* همگراست.

اثبات: به [7] مراجعه شود.

فصل دوم

مقدمه‌ای بر بهینه‌سازی غیر خطی

هدف این فصل یادآوری نکات لازم از مباحث بهینه‌سازی نامقید، الگوریتم‌های بهینه‌سازی، و ... که در این پایان‌نامه مورد استفاده قرار می‌گیرد می‌باشد. در بیشتر موارد از آوردن اثبات صرفه نظر شده است.

۲-۲ بهینه‌سازی نامقید

مسائل بهینه‌سازی شکل‌های متفاوتی دارند و براساس نوع و شکل مسئله به دسته‌های متفاوتی تقسیم می‌گردند. یکی از مهم‌ترین این دسته‌ها مسائل بهینه‌سازی غیرخطی نامقید می‌باشد که بحث اصلی این پایان‌نامه به بررسی و ارائه الگوریتم‌های جدید و مناسب برای حل این مسئله اختصاص می‌یابد. در شرح این بخش شکل عمومی این مسئله را در نظر می‌گیریم

$$\min_{x \in C} f(x), \quad (1-2)$$

که در آن C را یک مجموعه‌ی محدب دلخواه در نظر می‌گیریم که عموماً آن را برابر R^n قرار می‌دهیم. تابع $f: R^n \rightarrow R$ تابعی با مشتقات جزئی مرتبه دوم پیوسته روی C است. برای حل این گونه مسائل به‌طور معمول از الگوریتم‌های تکراری استفاده می‌گردد که در بخش بعد به‌طور خلاصه مورد بررسی قرار می‌گیرند.

۲-۳ الگوریتم‌های بهینه‌سازی

بیشتر الگوریتم‌هایی که برای حل مسائل بهینه‌سازی طراحی شده‌اند، از نوع الگوریتم‌های تکراری هستند. در روند جستجو برای یافتن جواب این مسئله با انتخاب یک نقطه‌ی اولیه از یک فرایند تکراری، گام به گام به دنبال بهبود جواب در هر مرحله هستیم. با ادامه این روند، معمولاً یک دنباله متوالی از نقاط تولید می‌شود جایی که ایده‌آل همگرایی این دنباله به نقطه جواب است. برای مسائل بهینه‌سازی خطی دنباله‌ی تولید شده متناهی است و الگوریتم پس از تعداد متناهی مرحله (گرچه این تعداد در آغاز دقیقاً مشخص نیست) به نقطه‌ی جواب می‌رسد. در مسائل بهینه‌سازی غیرخطی، نمی‌توان انتظار داشت که دنباله در حالت کلی جواب دقیق را تولید کند. بنابراین در عمل هنگامی که نقطه‌ای به اندازه کافی نزدیک به جواب تولید گردد، این فرایند متوقف می‌شود. یک الگوریتم خوب باید توانا، کارا و دقیق باشد، به این مفهوم که با وجود تولید خطا در حین اجرا، توانایی محاسبه جواب را داشته باشد و بیش از اندازه به زمان محاسبه یا ذخیره‌سازی نیاز نداشته باشد و همچنین توانایی یافتن جواب دقیق را داشته باشد. لازم به ذکر است که این اهداف معمولاً ناسازگارند.

موضوعاتی مانند مرتبه همگرایی، نیازهای ذخیره‌سازی، سرعت و عوامل دیگر موضوعات اساسی در بهینه‌سازی هستند، که مقایسه‌ی الگوریتم‌های مختلف را امکان‌پذیر می‌سازند.

در جهت سهولت و اختصار در نوشتار، اگر x_k عنصر k ام دنباله و x^* جواب مینیمم یا نقطه ایستای (۲-۱) باشد آن گاه $f(x_k)$ را با f_k ، $\nabla f(x_k)$ را با g_k ، $\nabla^2 f(x_k)$ را با G_k و $f(x^*)$ را با f^* نمایش داده می شود.

تعریف ۲-۳-۱: فرض کنید تابع $f: R^n \rightarrow R$ داده شده باشد.

۱. نقطه $x^* \in R^n$ را مینیمم موضعی تابع f گویند، هرگاه

$$\exists \epsilon > 0 \text{ s.t. } \forall x \in R^n \text{ if } \|x - x^*\| \leq \epsilon \rightarrow f(x^*) \leq f(x).$$

۲. نقطه $x^* \in R^n$ را مینیمم سراسری تابع f گویند، هرگاه

$$\forall x \in R^n \quad f(x^*) \leq f(x).$$

۳. نقطه $x^* \in R^n$ را مینیمم موضعی اکید تابع f گویند، هرگاه

$$\exists \epsilon > 0 \text{ s.t. } \forall x \in R^n \text{ if } 0 < \|x - x^*\| \leq \epsilon \rightarrow f(x^*) < f(x).$$

۴. نقطه $x^* \in R^n$ را مینیمم سراسری اکید تابع f گویند، هرگاه

$$\forall x \in R^n \quad f(x^*) < f(x).$$

تعریف ۲-۳-۲:

الف) فرض کنید مشتقات جزئی تابع $f: R^n \rightarrow R$ برای هر $1 \leq j \leq n$ موجود است آنگاه بردار گرادیان تابع f بصورت زیر نشان داده می شود

$$g(x) = \nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T.$$

ب) فرض کنید تابع $f: R^n \rightarrow R$ دارای مشتقات جزئی مرتبه دوم باشد آنگاه ماتریس هسی بصورت زیر تعریف می شود

$$G(x) = \nabla^2 f(x) = \nabla(\nabla f(x))^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}. \quad (2-2)$$

واضح است که اگر تابع f دوبار بطور پیوسته مشتق پذیر باشد آنگاه $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$ و لذا ماتریس فوق متقارن است.

در حل مسئله (۲-۱)، هدف یافتن نقطه مینیمم سراسری تابع f است، اما این هدف معمولاً عملی نیست بنابراین به نقطه مینیمم موضعی اکتفا می‌شود. البته تحت شرایط محدب بودن تابع f می‌توان ثابت کرد که هر نقطه‌ی مینیمم موضعی، یک مینیمم سراسری نیز است. در زیر برخی از فرض‌های مربوط به تحدب بیان شده است.

تعریف ۲-۳-۳:

(۱) **مجموعه محدب:** [25] گوئیم $S \subseteq R^n$ یک مجموعه محدب است، اگر ترکیب محدب از هر دو عضو S عضوی از S باشد. یعنی برای هر $x_1, x_2 \in S$ آنگاه به ازای هر $0 \leq \lambda \leq 1$ داشته باشیم

$$\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in S.$$

(۲) **تابع محدب:** [25] تابع $f: R^n \rightarrow R$ را روی مجموعه محدب $S \subseteq R^n$ ، محدب گوئیم در صورتیکه به ازای هر $x_1, x_2 \in S$ و هر $0 \leq \lambda \leq 1$ داشته باشیم

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2),$$

اگر در تعریف بالا تساوی را برداریم آنگاه تابع f را روی مجموعه محدب S ، اکیدا محدب گوئیم.

(۳) **تابع به‌طور یکنواخت محدب^۲:** تابع $f: R^n \rightarrow R$ را روی مجموعه محدب و ناتهی $S \subseteq R^n$ ، به‌طور یکنواخت محدب گفته می‌شود اگر ثابت $\mu > 0$ وجود داشته باشد، به‌طوری‌که به ازای هر $x_1, x_2 \in S$ و هر $\lambda \in [0, 1]$ رابطه زیر برقرار باشد

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) - \frac{1}{2} \lambda \mu (1 - \lambda) \|x_1 - x_2\|^2.$$

اگر تابع f مشتق پذیر باشد، آنگاه لم زیر را داریم [25].

لم ۲-۳-۱: فرض کنید تابع f به‌طور پیوسته مشتق پذیر باشد و $S \subseteq R^n$ یک مجموعه محدب است.

۱. تابع f محدب است اگر و تنها اگر به ازای هر $x_1, x_2 \in S$ داشته باشیم

$$f(x_2) \geq f(x_1) + \nabla f(x_1)^T (x_2 - x_1).$$

۲. تابع f اکیدا محدب است اگر و تنها اگر به ازای هر $x_1, x_2 \in S$ که $x_1 \neq x_2$ داشته باشیم:

$$f(x_2) > f(x_1) + \nabla f(x_1)^T (x_2 - x_1).$$

۳. تابع f بطور یکنواخت محدب است اگر و تنها اگر

$$\forall x_1, x_2 \in S : f(x_2) \geq f(x_1) + \nabla f(x_1)^T (x_2 - x_1) + \frac{1}{2} \mu \|x_2 - x_1\|^2,$$

² Uniformly convex function

که در آن $\mu > 0$ یک عدد ثابت است.

لم ۲-۳-۲: تابع به طور پیوسته مشتق پذیر f ، روی مجموعه محدب و ناتهی $S \subseteq R^n$ ، به طور یکنواخت محدب است اگر و تنها اگر

$$\forall x_1, x_2 \in S : (\nabla f(x_2) - \nabla f(x_1))^T (x_2 - x_1) \geq \mu \|x_2 - x_1\|^2$$

که در آن $\mu > 0$ یک عدد ثابت است. این خاصیت به خاصیت یکنوایی یکنواخت بردار گرادیان مشهور است.

تعریف ۲-۳-۴: ماتریس $A \in R^{n \times n}$ را معین مثبت می‌نامیم اگر و تنها اگر به ازای هر $x \in R^n$ داشته باشیم $x^T A x > 0$.

چنانچه به ازای هر $x \in R^n$ داشته باشیم $x^T A x \geq 0$ ، آنگاه نیمه معین مثبت است.

تعریف ۲-۳-۵: تابع $f: R^n \rightarrow R$ را یک تابع مجذوری گوئیم هرگاه

$$\exists Q \in R^{n \times n}, C \in R^n, d \in R \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + C^T x + d,$$

در حالت خاص اگر $Q = 0$ تابع را آفین گوئیم، اگر $Q = 0$ و $d = 0$ تابع f را خطی گویند. در حالت کلی می‌توان Q را متقارن فرض کرد.

لم ۲-۳-۳: [16] فرض کنید تابع f دارای مشتقات جزئی مرتبه دوم پیوسته باشد در این صورت تابع f روی مجموعه محدب S شامل نقاط درونی، محدب است اگر و تنها اگر ماتریس هسی G در سراسر S نیمه معین مثبت باشد.

قضیه ۲-۳-۱: [17] اگر تابع f روی S ، محدب باشد آن‌گاه هر مینیمم موضعی آن یک مینیمم سراسری است. با توجه به قضیه فوق، اگر در مسئله بهینه‌سازی (۱-۲) تابع هدف محدب باشد، آن‌گاه هر جواب موضعی مسئله یک جواب سراسری برای مسئله نیز می‌باشد.

یکی از مهم‌ترین قضایای پر کاربرد در بهینه‌سازی، قضیه تیلور می‌باشد. در واقع بیشتر الگوریتم‌های بهینه‌سازی به نحوی بر پایه این قضیه استوار هستند. براساس این قضیه، اگر مشتق مرتبه‌ی $n + 1$ ام تابع حقیقی f وجود داشته باشد، f را می‌توان با یک چند جمله‌ای از درجه n تقریب زد. در ادامه قضیه تیلور را بیان می‌کنیم.

قضیه ۲-۳-۲: (قضیه تیلور) [17] فرض کنید f یک تابع حقیقی بر $[a, b]$ بوده و n یک عدد طبیعی باشد. اگر f روی $[a, b]$ ، n بار به طور پیوسته مشتق پذیر و $f^{(n+1)}$ بر روی (a, b) موجود باشد، آن‌گاه برای هر دو نقطه x و c در $[a, b]$ داریم

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(c)}{k!} (x-c)^k + E_n(x),$$

که در آن، به ازای نقطه‌ای مانند ξ بین x و c داریم

$$E_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)(x-c)^{n+1}.$$

این قضیه در حالت خاص $n=0$ به قضیه مقدار میانگین تبدیل می‌شود.

در ادامه قضیه تیلور چند متغیره که در بهینه‌سازی کاربردهای فراوانی دارد و در فصل‌های بعدی مورد نیاز است، ذکر شده است.

قضیه ۲-۳-۳: (قضیه تیلور برای توابع n متغیره) [17] فرض کنید $f: R^n \rightarrow R$ به طور پیوسته مشتق پذیر است و $p \in R^n$. آن‌گاه $t \in (0, 1)$ موجود است که

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p,$$

به علاوه اگر f دو بار به طور پیوسته مشتق پذیر باشد، $t \in (0, 1)$ موجود است که

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p + O(\|p\|^3).$$

در ادامه با نگاهی به تعریف نقاط اکسترمم معلوم می‌شود که این تعریف روش علمی را برای بیان نقاط اکسترمم توابع در اختیار ما قرار نمی‌دهد، بنابراین دنبال شرایطی هستیم که بتوان این نقاط را تعیین کرد. از این رو در ادامه به بیان شرایط لازم و کافی برای یافتن نقاط اکسترمم می‌پردازیم.

قضیه ۲-۳-۴: (شرایط لازم مرتبه اول) [17] فرض کنید تابع $f: R^n \rightarrow R$ بطور پیوسته مشتق پذیر باشد. اگر نقطه x^* یک مینیمم موضعی تابع f باشد، آن‌گاه $\nabla f(x^*) = 0$.

توجه داریم که شرط $\nabla f(x^*) = 0$ یک شرط لازم برای مینیمم موضعی بودن x^* است اما یک شرط کافی نیست. بنابراین شرط $\nabla f(x^*) = 0$ مینیمم بودن را ایجاب نمی‌کند. به عبارتی چنین نقاطی لزوماً مینیمم نیستند، بلکه نقاط ایستا نامیده می‌شوند. بر طبق قضیه (۲-۳-۱) هر مینیمم کننده موضعی یک نقطه ایستا می‌باشد. لم زیر نشان می‌دهد در حالتی که تابع f محدب باشد، شرط $\nabla f(x^*) = 0$ به یک شرط کافی تبدیل می‌شود.

لم ۲-۳-۵: [17] فرض کنید f یک تابع محدب به طور پیوسته مشتق پذیر باشد. نقطه $x^* \in R^n$ یک مینیمم موضعی تابع f است اگر و تنها اگر $\nabla f(x^*) = 0$.

قضیه ۲-۳-۵: (شرایط لازم مرتبه دوم) [17] فرض کنید تابع $f: R^n \rightarrow R$ دوبار به طور پیوسته مشتق پذیر باشد. اگر نقطه x^* مینیمم موضعی تابع f باشد و $\nabla^2 f$ بر روی یک همسایگی باز x^* موجود و پیوسته باشد، آن‌گاه $\nabla f(x^*) = 0$ و $\nabla^2 f(x^*)$ نیمه معین مثبت است.

قضیه ۲-۳-۶: (شرایط کافی مرتبه دوم) [17] فرض کنید تابع $f: R^n \rightarrow R$ دو بار به طور پیوسته مشتق پذیر و $\nabla^2 f$ بر روی همسایگی باز x^* پیوسته باشد. اگر $\nabla f(x^*) = 0$ و $\nabla^2 f(x^*)$ معین مثبت باشد، آن گاه x^* یک مینیمم موضعی اکید تابع f است.

لازم به ذکر است که شرایط کافی مرتبه دوم، ممکن است شرط لازم برای مینیمم موضعی اکید نباشند، به عبارتی نقطه x^* ممکن است که یک مینیمم کننده موضعی اکید باشد، اما در شرایط کافی مرتبه دوم صدق نکند. به عنوان مثال در تابع $f(x) = x^8$ نقطه $x^* = 0$ یک مینیمم کننده موضعی اکید تابع است اما ماتریس هسی آن نیمه معین مثبت است.

۲-۴ الگوریتم‌های کاهش‌ی برای بهینه‌سازی نامقید

اکنون به هدف اصلی باز می‌گردیم، مسئله بهینه‌سازی نامقید که به فرم کلی زیر است را در نظر می‌گیریم.

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

در واقع هدف اصلی ساخت الگوریتم‌های مناسب برای حل این مسئله است. به دنبال یافتن مینیمم‌های موضعی تابع بالا هستیم. اگر تابع هدف ما تابعی محدب باشد آن گاه هر مینیمم موضعی آن یک مینیمم سراسری است. اساس کار، ارائه یک الگوریتم تکراری و در نهایت تولید دنباله‌ای است که به جواب مسئله همگرا شود. اما با توجه به این که اطلاعات کمی در مورد جواب داریم دنباله را به گونه‌ای می‌سازیم که

$$\nabla f(x_k) \rightarrow \nabla f(x^*) = 0.$$

در واقع این شرط، همان شرط لازم مرتبه اول برای جواب می‌باشد که ممکن است ما را به نقاط ماکسیمم یا نقاط زینی نیز هدایت کند، بنابراین سعی می‌شود الگوریتم به گونه‌ای طراحی شود که علاوه بر رعایت شرط فوق، احتمال رسیدن به نقطه مینیمم را افزایش دهد. یک ایده ساده و کارا این است که الگوریتم به گونه‌ای طراحی شود که در هر مرحله مقدار تابع هدف کاهش یابد، این کار احتمال رسیدن به نقطه مینیمم را افزایش می‌دهد. طرح این الگوریتم‌ها و کاربرد و جزئیات تحلیل آن‌ها تفاوت بسیاری با هم دارند و در میان آن‌ها هم الگوریتم‌های ساده و هم الگوریتم‌های فوق العاده پیچیده موجود است اما همگی این الگوریتم‌ها، الگوریتم‌های تکراری کاهش‌ی هستند، به این مفهوم که یک رشته از نقاط تولید می‌کنند که هر نقطه بر مبنای نقاط قبلی محاسبه می‌شود و در هر نقطه جدیدی که به وسیله الگوریتم به دست می‌آید، مقدار تابع کاهش پیدا می‌کند. مطلوب آن است که دنباله نقاط تولید شده به وسیله الگوریتم طی تعداد متناهی یا نامتناهی تکرار به یک جواب مسئله اصلی همگرا شود.

معمولاً الگوریتم کاهش‌ی مورد نظر از یک فرآیند تکراری به دست می‌آید که به صورت زیر است

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad (۳-۲)$$

که در آن به دنبال یک جهت جستجو $d_k \in R^n$ و یک طول گام $\alpha_k > 0$ هستیم بطوریکه که $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ در این فرآیند، انتخاب مناسب d_k و α_k از گام‌های کلیدی می‌باشد. در راستای انتخاب مناسب d_k ، بسط تیلور تابع f حول نقطه x_k در راستای بردار d_k بصورت زیر در نظر می‌گیریم

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = f_k + \alpha_k g_k^T d_k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 d_k^T G_k d_k + O(\|d_k\|^3).$$

اگر $\alpha_k > 0$ و $g_k^T d_k < 0$ به اندازه کافی کوچک باشد، آن‌گاه $f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f_k$. بنابراین شرط $g_k^T d_k < 0$ یک شرط کافی برای این است که f در راستای d_k قابلیت کاهش داشته باشد. در این حالت اصطلاحاً گفته می‌شود d_k یک جهت کاهش است. پس از تعیین جهت کاهش d_k ، طول گام α_k در فرآیند به نام جستجوی خطی که در واقع نوعی بهینه‌سازی یک متغیره است معین می‌گردد. که بدیهی‌ترین روش انتخاب طول گام α_k ، جستجوی خطی دقیق می‌باشد.

یک ایده مناسب و بدیهی استفاده حداکثری از جهت کاهش مقدار تابع است در این حالت جستجوی خطی یک بهینه‌سازی یک متغیره است، یعنی:

$$\alpha_k := \operatorname{argmin} f(x_k + \alpha d_k).$$

که به جستجوی خطی دقیق معروف می‌باشد. اکنون الگوریتم عمومی جریان کاهش برای مینیمم‌سازی تابع f را می‌توان به صورت زیر بیان کرد.

| الگوریتم ۱-۲ (الگوریتم عمومی جریان کاهش) |
|--|
| ورودی: بردار آغازین x_0 . |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$ و $x_k = x_0$. |
| گام (۱): جهت کاهش d_k صادق در شرط $g_k^T d_k < 0$ را پیدا کن. اگر چنین جهتی موجود نیست توقف کن، در این حالت x_k جواب بهینه است. |
| گام (۲): α_k را با استفاده از جستجوی خطی به گونه‌ای محاسبه کن که |
| $f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k)$ |
| گام (۳): قرار ده $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. |
| گام (۴): در صورت برقراری شرط توقف، توقف کن و در غیر این صورت $k = k + 1$ و به گام (۱) برو. |

یکی از عناصر مهم و کلیدی این الگوریتم انتخاب بردار x_0 است. از دیگر عناصر تاثیرگذار در عملکرد الگوریتم‌های مینیمم‌سازی، چگونگی تعیین طول گام α_k و همچنین چگونگی تولید جهت جستجوی d_k می‌باشد.

هر الگوریتم تکراری با یک نقطه آغازین شروع می‌شود. اگر برای هر نقطه آغازین الگوریتم دنباله‌ای از نقاط را تولید کند که همگرا به یک جواب شود آن گاه الگوریتم را همگرای سراسری گویند اما اگر همگرایی به نقطه آغازین بستگی داشته باشد آن گاه الگوریتم را همگرای موضعی می‌نامند. قطعاً تمام الگوریتم‌ها این خاصیت مطلوب ندارند، در واقع بسیاری از مهم‌ترین الگوریتم‌ها برای حل مسائل بهینه‌سازی غیرخطی همگرای سراسری نیستند و در نتیجه گاهی دنباله‌هایی تولید می‌شود که یا اصلاً همگرا نیستند و یا همگرایی به سمت نقاطی است که جواب مسئله نیستند. ولی اغلب این امکان وجود دارد که چنین الگوریتم‌هایی را با افزودن ابزارهای خاص به گونه‌ای اصلاح کرد که همگرایی سراسری آن‌ها تضمین شود.

یکی دیگر از خواص مطلوب برای الگوریتم‌های بهینه‌سازی نامقید، این است که بتوانیم ثابت کنیم الگوریتم برای مسائل درجه دوم در تعداد متناهی تکرار به جواب x^* همگرا باشد، در این صورت گوئیم الگوریتم دارای «خاصیت مدل درجه دوم» است. این ویژگی از این نظر برای ما مطلوب است که همواره تابع f که در همسایگی x^* با یک مدل درجه دوم تطابق دارد.

در ادامه این فصل، بررسی مختصر از مهم‌ترین الگوریتم‌های کاهشی برای بهینه‌سازی غیرخطی نامقید مطرح می‌گردد.

۲-۴-۱ روش تندترین کاهش

یکی از قدیمی‌ترین و شناخته‌شده‌ترین روش‌ها برای مینیمم‌سازی یک تابع چند متغیره، روش تندترین کاهش است که به روش گرادیان نیز مشهور است. این روش از دیدگاه نظری فوق‌العاده مهم است، زیرا اولاً یکی از ساده‌ترین روش‌هایی است که برای آن یک تحلیل قانع‌کننده وجود دارد. ثانیاً انگیزه تعداد زیادی از الگوریتم‌های پیشرفته‌تر اغلب از تلاش برای اصلاح روش گرادیان، به نحوی که تولید الگوریتم‌های جدید دارای خواص همگرایی بهتری باشند، به وجود آمده‌اند. بنابراین روش گرادیان نه تنها اولین روشی است که می‌تواند برای حل یک مسئله امتحان شود، بلکه مرجعی برای سنجش موثر بودن سایر روش‌ها نیز می‌باشد.

فرض کنید تابع f دارای مشتقات جزئی پیوسته مرتبه اول در R^n باشد. الگوریتم تکراری روش تندترین کاهش با انتخاب بردار جهت $d_k = -\nabla f_k = -g_k$ به وضوح یک جهت کاهشی است زیرا

$$d_k^T g_k = -\|g_k\|^2 < 0.$$

از جمله خواص مطلوب روش گرادیان

۱. این روش هزینه محاسباتی کمی دارد.

۲. در الگوریتم گرادیان نیازی به محاسبه مشتقات مرتبه دوم تابع وجود ندارد.

۳. همگرایی سراسری دارد و دور از جواب نتایج مطلوبی تولید می کند.

علی رغم این که روش گرادیان از نظر محاسباتی بسیار کم هزینه می باشد اما دارای مشکلاتی نیز می باشد که از مهم ترین آن ها می توان به موارد زیر اشاره کرد

۱. مینیم سازی یک تابع محدب توسط روش گرادیان ممکن است یک فرآیند متناهی نباشد.

۲. از نظر همگرایی کند و مرتبه همگرایی آن خطی است.

۳. مشکل دیگر امکان رخ دادن پدیده زیگ زاگ است.

۴. فاقد خاصیت مدل درجه دوم می باشد.

برای افزایش مرتبه همگرایی روش گرادیان پژوهش های بسیاری انجام گردیده است که در نتیجه این تلاش ها روش های گرادیان مزدوج ارائه شده اند. که در فصل بعد به طور مختصر معرفی می گردد.

در این بخش از پایان نامه روش نیوتن مورد بررسی قرار گرفته است.

۲-۴-۲ روش نیوتن

یکی از روش های پرطرفدار برای حل مسائل بهینه سازی نامقید روش نیوتن می باشد. یکی از مهم ترین دلایل توجه به این روش سرعت همگرایی بالای آن است. به همین دلیل، از این روش به طور وسیعی در حل مسائل بهینه سازی غیر خطی و نیز حل دستگاه های غیر خطی استفاده می شود.

ایده اصلی روش نیوتن استفاده از تقریب مجذوری تابع هدف در نقطه x_k و مینیم کردن این تابع تقریب به جای تابع اصلی در هر تکرار می باشد. برای این منظور ابتدا فرض می کنیم که تابع $f: R^n \rightarrow R$ دوبار به طور پیوسته مشتق پذیر و محدب اکید است. جهت جستجوی نیوتن در بهینه سازی چند بعدی بر پایه مینیم کردن یک تقریب مرتبه دوم تابع f است. با تقریب مجذوری حول نقطه x_k داریم

$$q(x) := f_k + g_k^T(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T G_k(x - x_k).$$

می توان نشان داد $q(x)$ محدب اکید است اگر و تنها اگر G_k معین مثبت باشد. با توجه به این که $q(x)$ محدب اکید است مینیم مقدار تابع $q(x)$ وقتی که گرادیان آن مساوی بردار صفر باشد به دست می آید. به عبارت دیگر در نقطه x_k داریم

$$\nabla q(x) = g_k + G_k(x - x_k) = 0.$$

با قرار دادن $x_{k+1} = x_k - G_k^{-1}g_k$ به صورت $\{x_k\}$ کاهشی در رابطه بالا دنباله کاهشی $x_{k+1} = x_k - G_k^{-1}g_k$ به صورت $\{x_k\}$ کاهشی در رابطه بالا دنباله کاهشی $x_{k+1} = x_k - G_k^{-1}g_k$ می شود، که به این معنی است در روش نیوتن، بردار جهت $d_k = -G_k^{-1}g_k$ می باشد و طول گام $\alpha_k = 1$

(بدون استفاده از جستجوی خطی) است. با توجه به آنچه گفته شد الگوریتم روش نیوتن را می توان به صورت زیر بیان کرد.

| الگوریتم ۲-۲ (الگوریتم روش نیوتن) |
|--|
| ورودی: نقطه آغازین x_0 . |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$. |
| گام (۱): محاسبه کن $d_k = -G_k^{-1}g_k$ ، به طوری که $G_k = \nabla^2 f(x_k)$ و $g_k = \nabla f(x_k)$. |
| گام (۲): قرار ده $x_{k+1} = x_k + d_k$. |
| گام (۳): تا رسیدن به دقت مورد نظر فرآیند را تکرار کن. |

طبق قضیه زیر اگر نقطه‌ی آغازین به اندازه‌ی کافی نزدیک به نقطه‌ی مینیمم باشد آن گاه روش نیوتن همگرایی مجذوری دارد.

قضیه ۲-۴-۱: [17] فرض کنید $f \in C^2$ ، x^* یک نقطه‌ی مینیمم کننده‌ی موضعی f و ماتریس هسی در همسایگی x^* پیوسته لیپ شیتز باشد. یعنی

$$\exists \epsilon > 0, L > 0 \quad s.t. \quad \forall x, y \in N_\epsilon(x^*) \Rightarrow \|G(x) - G(y)\| \leq L\|x - y\|,$$

اگر برای k به اندازه کافی بزرگ x_k به x^* نزدیک باشد و G^* معین مثبت باشد، آن گاه روش نیوتن خوش تعریف و نرخ همگرایی آن مجذوری است.

با توجه به گام نیوتن داریم $d_k^T g_k = -g_k^T G_k^{-1} g_k$ ، واضح است جهت نیوتن در شرایط کاهش است که اگر $g_k^T G_k^{-1} g_k > 0$ برقرار باشد، از طرفی اگر در نزدیکی جواب مسئله یعنی x^* باشیم آن گاه G^* معین مثبت است و لذا بنابر پیوستگی مشتق مرتبه دوم، G_k نیز معین مثبت است. لذا کاهشی بودن الگوریتم در نزدیکی جواب تضمین می گردد این در حالی است که روش نیوتن دور از جواب خوب عمل نمی کند و حتی ممکن است کاهشی نباشد.

تذکر ۲-۴-۱: با توجه به این که محاسبه‌ی وارون ماتریس هسی بسیار پرهزینه است، عملاً به جای محاسبه d_k از رابطه $d_k = -G_k^{-1}g_k$ ، d_k را یک جواب دستگاه $G_k d_k = -g_k$ در نظر می گیریم.

یکی از مشکلات عمده‌ی روش نیوتن این است که ماتریس هسی G_k لزوماً معین مثبت نمی باشد در این حالت هیچ تضمینی برای کاهشی بودن روش موجود نیست. برای غلبه بر این مشکل، محققان تلاش کردند الگوریتم روش نیوتن را به گونه‌ای اصلاح نمایند که در هر گام ماتریس G_k معین مثبت باقی بماند. در ادامه برخی از روش‌های ارائه شده در این زمینه را بیان می کنیم.

۱. هنگامی که G_k وارون پذیر نباشد، جهت d_k از روش نیوتن قابل محاسبه نیست و همچنین هنگامی که G_k معین مثبت نباشد d_k محاسبه شده کاهشی نمی باشد لذا یک ایده قرار دادن $d_k = -g_k$ است که همان جهت روش گرادیان می باشد، البته ممکن است استفاده از این جهت الگوریتم را کند یا دچار زیگزاگ کند.

۲. هنگامی که ماتریس وارون پذیر G_k معین مثبت نباشد جهت به دست آمده از روش نیوتن ممکن است کاهشی نباشد. در این صورت یک ایده این است که به جای G_k یک تقریب معین مثبت از آن مانند B_k را جایگزین کرد در این صورت داریم $d_k = -B_k^{-1}g_k$.

۳. هنگامی که اطلاعاتی درباره ی رفتار G_k نداریم، یک ایده ی دیگر تعویض G_k با ماتریس $G_k + \gamma I$ است که در آن $\gamma \geq 0$ به گونه ای انتخاب می شود که ماتریس $G_k + \gamma I$ معین مثبت و در نتیجه وارون پذیر باشد. در این صورت جهت d_k از رابطه زیر حاصل می شود

$$(G_k + \gamma I)d_k = -g_k \Rightarrow d_k = -(G_k + \gamma I)^{-1}g_k,$$

که به علت معین مثبت بودن $G_k + \gamma I$ ، d_k یک جهت کاهشی است.

۴. یک اصلاح دیگر G_k ، اصلاح آن به وسیله یک ماتریس قطری E_k ، با درایه های قطری مثبت است به طوری که $G_k + E_k$ معین مثبت شود. باید توجه داشت که در E_k عناصر قطری لزوما یکسان نیستند.

۲-۴-۳ روش شبه نیوتن

هزینه محاسباتی روش نیوتن بالاست، زیرا در هر مرحله نیاز به محاسبه n مشتق مرتبه اول برای محاسبه g_k و n^2 مشتق مرتبه دوم برای محاسبه G_k دارد. که این مشکل ما را به سمت خانواده روش های شبه نیوتن سوق می دهد، که در آن از یک تقریب B_k برای ماتریس هسی G_k استفاده می شود، به طوری که B_k یک ماتریس معین مثبت باشد. این ایده هم کاهشی بودن d_k را تضمین می نماید و هم مشکل هزینه محاسبات G_k را بر طرف می سازد و در عین حال قادر به حفظ خواص مطلوب روش نیوتن از جمله سرعت همگرایی بالای آن نیز می باشد. در این بخش ابتدا شرایطی را که نیاز است ماتریس B_k در آن صدق کند و سپس الگوریتم عمومی روش های شبه نیوتن بیان می گردند.

فرض کنید $f: R^n \rightarrow R$ دو بار به طور پیوسته مشتق پذیر باشد، با استفاده از بسط تیلور بردار گرادیان تابع f حول نقطه x_{k+1} داریم

$$g(x) \approx g_{k+1} + G_{k+1}(x - x_{k+1}).$$

اگر در رابطه اخیر $x = x_k$ انتخاب گردد، آن گاه رابطه زیر حاصل می شود

$$y_k \approx G_{k+1}s_k,$$

که در آن

$$s_k = x_{k+1} - x_k \text{ و } y_k = g_{k+1} - g_k.$$

به وضوح رابطه فوق برای توابع مجذوری به طور دقیق برقرار است. چون قرار است ماتریس B_{k+1} به عنوان یک تقریب مناسب از G_{k+1} در نظر گرفته شود، بنابراین به نظر می رسد بهتر است ماتریس B_{k+1} به گونه ای تولید گردد که رفتاری مشابه با G_{k+1} داشته باشد. یک ایده بسیار مهم این است که B_{k+1} به گونه ای انتخاب شود که در رابطه سکانت صادق باشد یعنی

$$B_{k+1} s_k = y_k . \quad (۴-۲)$$

تقریباً تمام روش های شبه نیوتن بر این اصل استوار هستند که ماتریس تقریبی B_k باید به گونه ای ساخته شود که در شرط سکانت صادق باشد. به طور کلی، در حالت ایده آل، روش های شبه نیوتن به ماتریس هسی در نقطه جواب همگرا می شوند و در مجموع تا حدودی همانند روش نیوتن عمل می کنند.

تذکره ۲-۴-۲. همان طور که در بخش قبل بیان شد، جهت روش نیوتن از رابطه $d_k = -G_k^{-1} g_k$ به دست می آید. از آن جا که یکی از تفاوت های کلیدی روش های شبه نیوتن با روش نیوتن در به کارگیری ماتریس تقریبی B_k به جای هسی واقعی G_k می باشد بنابراین جهت روش های شبه نیوتن از رابطه زیر محاسبه می شود

$$d_k = -B_k^{-1} g_k . \quad (۵-۲)$$

الگوریتم کلی روش های شبه نیوتن به صورت زیر بیان می شود.

| الگوریتم ۲-۳ (روش های شبه نیوتن) |
|--|
| <p>ورودی: بردار آغازین $x_0 \in R^n$، ماتریس معین مثبت $B_0 \in R^{n \times n}$.</p> <p>گام (۰): قرار ده $k = 0$.</p> <p>گام (۱): در صورت برقراری شرط توقف، توقف کن.</p> <p>گام (۲): جهت جستجوی d_k را از حل دستگاه $B_k d_k = -g_k$ محاسبه کن.</p> <p>گام (۳): $\alpha_k > 0$ را با استفاده از یک جستجوی خطی در راستای d_k، محاسبه کن و قرار ده</p> $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k .$ <p>گام (۴): B_{k+1} را از روی ماتریس B_k بهنگام کن به طوری که رابطه سکانت برقرار باشد.</p> <p>گام (۵): $k = k + 1$ و به گام (۱) برو.</p> |

با توجه به الگوریتم روش شبه نیوتن دیده می شود که مهم ترین گام در الگوریتم عمومی روش های شبه نیوتن چگونگی تولید ماتریس B_{k+1} از B_k می باشد که به بهنگام سازی ماتریس هسی معروف است. در ادامه به تعدادی از ایده های موجود برای بهنگام سازی ماتریس هسی اشاره می نمایم.

- بهنگام رتبه یک
- بهنگام های رتبه دو

بهنگام رتبه یک (SR1)

اولین و ساده‌ترین ایده برای ساخت B_{k+1} ، تغییر B_k به وسیله کمترین تغییرات ممکن است، که هرچه این تقریب نزدیک‌تر باشد هزینه کمتری برای بهنگام‌سازی در بر خواهد داشت. در بهنگام‌سازی رتبه یک برای بهنگام‌سازی ماتریس B_k می‌توان قرار داد

$$B_{k+1} = B_k + E_k,$$

که در آن E_k یک ماتریس با رتبه یک است، که تقریب ماتریس هسی را بهنگام می‌سازد. این بهنگام نخستین بار در سال ۱۹۶۷ توسط برویدن و سپس در سال ۱۹۶۸ به‌طور مستقل توسط دیویدان^۳ و در سال ۱۹۶۹ توسط مارتاژ^۴ و سرگنت^۵ ارائه شد [8]. یک بهنگام رتبه یک می‌تواند به‌صورت زیر تعریف شود

$$B_{k+1} = B_k + \alpha uv^T,$$

که در آن u و v بردار و α عددی ثابت است. حال باید این مقادیر را به‌گونه‌ای به‌دست آوریم که B_{k+1} در رابطه سکانت صدق کند

$$B_{k+1}s_k = y_k,$$

با قرار دادن بهنگام رتبه یک در رابطه سکانت داریم

$$B_k s_k + \alpha(v^T s_k)u = y_k,$$

بنابراین بردارهای u و v باید طوری انتخاب شوند که

$$\alpha(v^T s_k)u = y_k - B_k s_k,$$

برای این منظور یک پیشنهاد این است که

$$u = y_k - B_k s_k, \quad \alpha(v^T s_k) = 1 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{v^T s_k}.$$

به‌دلیل تقارن G_k ، تقارن تقریب آن نیز حائز اهمیت است. حال اگر B_k متقارن فرض شود برای تقارن تقریب بعدی یعنی B_{k+1} ، فقط کفایت uv^T متقارن باشد. برای متقارن بودن uv^T باید $uv^T = vu^T$ ، یعنی باید u ضریبی از v باشد. بنابراین یک انتخاب این است که $u = v$ در نتیجه

$$\alpha = \frac{1}{u^T s_k} = \frac{1}{(y_k - B_k s_k)^T s_k},$$

با یک جایگذاری ساده، رابطه بهنگام SR1 به‌صورت زیر تعریف می‌گردد

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}, \quad (6-2)$$

دو حالت زیر برای بهنگام رتبه‌ی یک SR1 وجود دارد:

³ Davidon

⁴ Murtagh

⁵ Sargent

(۱) $(y_k - B_k s_k)^T s_k \neq 0$ در این صورت واضح است که در فرآیند فوق ماتریس بهنگام B_{k+1} به طور منحصر به فرد از B_k تولید می گردد.

(۲) $(y_k - B_k s_k)^T s_k = 0$ در این صورت یکی از دو حالت زیر ممکن است اتفاق بیفتد.

الف) $y_k = B_k s_k$ این به این مفهوم است که نیازی به بهنگام نداریم و خود ماتریس B_k خواص مورد نظر برای B_{k+1} را داراست، بنابراین در این حالت کافی است قرار داده شود $B_{k+1} = B_k$.

ب) اگر $y_k \neq B_k s_k$ و $(y_k - B_k s_k)^T s_k = 0$ در این حالت واضح است فرآیند بهنگام شکست خورده و هیچ فرمول بهنگام رتبه یکی موجود نیست و در نتیجه باید از فرمول های بهنگام رتبه دوم کمک گرفت.

مشکلات روش SR1

۱. فرمول (۲-۶) معین مثبت بودن را فقط در صورتی حفظ می کند که $(y_k - B_k s_k)^T s_k > 0$ ، که این معادل با برقراری $1 < \frac{s_k^T B_k s_k}{y_k^T s_k}$ می باشد، این شرایط ممکن است در توابع مجذوری با جستجوی خطی دقیق هم برقرار نباشد، بنابراین برقراری این رابطه را نمی توان تضمین کرد. در واقع حتی تضمینی برای این که $(y_k - B_k s_k)^T s_k \neq 0$ موجود نیست، یعنی ممکن است رابطه خوش تعریف نباشد.
۲. فقط صفر بودن مخرج نیست که مشکل ایجاد می کند بلکه کوچک بودن مخرج نیز به دلیل رشد درایه های ماتریس B_{k+1} می تواند سبب مشکلاتی از جمله ناپایداری عددی روش گردد.

تذکره ۲-۴-۳: یک پیشنهاد عملی برای حفظ خوش تعریفی و جلوگیری از شکست این است که بهنگام زمانی صورت گیرد که

$$r \|s_k\| \| (y_k - B_k s_k) \| < | (y_k - B_k s_k)^T s_k |.$$

جایی که معمولاً در هنگام اجرا $r \cong 10^{-8}$ مورد استفاده قرار می گیرد.

با وجود مشکلات فوق این ایده خواص مناسبی نیز دارد که می تواند در توسعه این خانواده بسیار کارگشا باشد. قضیه زیر یکی از مهم ترین خواص این خانواده را بیان می نماید

قضیه ۲-۴-۲: اگر در هر مرحله از الگوریتم رابطه بهنگام (۲-۶) خوش تعریف باشد و مؤلفه های B_k برای هر k متناهی باشد و بردارهای s_1, s_2, \dots, s_n مستقل خطی باشند، آنگاه بهنگام رتبه یک (SR1) در حل مسائل درجه دوم محدب، در حداکثر $n + 1$ تکرار متوقف می شود و

$$B_{n+1} = G.$$

بدین ترتیب، اگرچه روش SR1 یک مثال عالی و ساده از چگونگی امکان اصولی به کارگیری اطلاعات جمع آوری شده در خلال فرآیند کاهش برای بهنگام نمودن تقریب ماتریس هسی است، اما محدودیت هایی نیز دارد. پس به نظر می رسد تغییراتی بیشتر از رتبه یک مورد نیاز است. در عمل مشاهده می شود که بهنگام های تولید شده از روش SR1 تقریب های خوبی برای ماتریس هسی تولید می کند و نتایج آن ها در بسیاری از موارد حتی از بهنگام های رتبه دو نیز بهتر است اما چون راهی برای تضمین معین مثبت بودن ماتریس B_k و در نتیجه تضمین کاهش

بودن جهت جستجو موجود نیست، بنابراین محققان به منظور یافتن فرمول‌های انعطاف پذیرتری برای بهنگام نمودن ماتریس‌های هسی، به سراغ بهنگام‌های رتبه دو رفتند که در ادامه آن‌ها را به طور مختصر بررسی می‌نماییم.

بهنگام‌های رتبه دو

در حالت کلی، فرمول عمومی بهنگام رتبه دو متقارن برای تقریب ماتریس G_k به صورت زیر ارائه می‌شود

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= B_k + [u \quad v] \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} [u \quad v]^T \\ &= B_k + auu^T + cvv^T + b(vu^T + uv^T). \end{aligned}$$

در این بخش به بررسی یک دسته از روش‌های بهنگام‌سازی رتبه دو متقارن پرداخته می‌شود. از بهنگام‌های رتبه دو متقارن می‌توان به بهنگام‌های $BFGS$ و DFP اشاره کرد.

۲-۴-۱- روش برویدن-فلچر-گلدفارب-شانو^۶ ($BFGS$)

یکی از بهترین فرمول‌های بهنگام رتبه دو که در سال ۱۹۷۰ توسط برویدن، فلچر، گلدفارب و شانو به طور مستقل از یکدیگر پیشنهاد گردید فرمول بهنگام $BFGS$ می‌باشد [8]. در این روش فرمول بهنگام رتبه دو متقارن ماتریس B_k به صورت زیر، مورد استفاده قرار می‌گیرد

$$B_{k+1} = B_k + \alpha uu^T + \beta vv^T, \quad (7-2)$$

از آن جایی که B_{k+1} باید در معادله سکانت صدق کند؛ بنابراین

$$(B_k + \alpha uu^T + \beta vv^T) s_k = y_k,$$

$$B_k s_k + \alpha u(u^T s_k) + \beta v(v^T s_k) = y_k,$$

یعنی بردارهای u و v و اسکالرهای α و β باید به گونه‌ای انتخاب شوند که

$$\alpha(u^T s_k)u + \beta(v^T s_k)v = y_k - s_k B_k. \quad (8-2)$$

در میان انتخاب‌های متعددی که برای α ، β ، u و v وجود دارد، یک انتخاب مناسب استفاده از بردارهای در دسترس می‌باشد که هزینه کمتری را به ما تحمیل کنند. یک پیشنهاد مناسب به صورت زیر می‌باشد

$$u = y_k \quad \text{و} \quad v = B_k s_k,$$

که منجر به انتخاب‌های زیر می‌گردد

$$\alpha = \frac{1}{y_k^T s_k}, \quad \beta = \frac{-1}{s_k^T B_k s_k}.$$

با قرار دادن α و β در معادله (7-2) و ساده سازی آن، رابطه بهنگام $BFGS$ به شکل زیر نتیجه می‌شود:

$$B_{k+1}^{BFGS} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}. \quad (9-2)$$

⁶ Broyden, Fletcher, Gold Farb, Shanno

اکنون با استفاده از این رابطه می توان الگوریتم شبه نیوتن $BFGS$ را بیان نمود.

الگوریتم ۲-۴ (الگوریتم $BFGS$)

ورودی: بردار آغازین $x_0 \in R^n$ ، ماتریس معین مثبت $B_0 \in R^{n \times n}$.

گام (۰): قرار ده $k = 0$.

گام (۱): در صورت برقراری شرایط توقف، توقف کن.

گام (۲): با حل دستگاه $B_k d_k = -g_k$ جهت جستجوی d_k را محاسبه کن.

گام (۳): با استفاده از یک روش جستجوی خطی مناسب در راستای d_k ، α_k را محاسبه کن.

گام (۴): قرار ده

$$s_k = \alpha_k d_k,$$

$$x_{k+1} = x_k + s_k,$$

$$y_k = g_{k+1} - g_k.$$

گام (۵): قرار ده

$$B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}.$$

گام (۶): $k = k + 1$ و به گام (۱) برو.

اکنون به طور خلاصه و با توجه به مجذوری و غیرمجذوری بودن تابع f ، می توان به برخی از خواص مهم روش $BFGS$ اشاره کرد.

روش $BFGS$ برای توابع مجذوری با هسی معین مثبت و جستجوی خطی دقیق خواص زیر را دارد

۱. الگوریتم روش $BFGS$ در حداکثر n تکرار به جواب می رسد یعنی $g_{n+1} = 0$ و $B_{n+1} = G$.

۲. رابطه سکانت برای قدم های پیشین حفظ می شود، یعنی برای $i = 1, 2, \dots, n$ رابطه ی زیر برقرار است

$$\forall j < i \quad B_i s_j = y_j.$$

۳. اگر $B_0 = I$ آن گاه مسیرهای تولید شده همان مسیرهای گرادیان مزدوج نسبت به ماتریس هسی تابع

درجه دوم می باشند و اگر B_0 ماتریسی دلخواه باشد مسیرهای تولید شده نسبت به B_0 مزدوج هستند.

به علاوه در مورد توابع عمومی ثابت شده است که

۴. روش $BFGS$ در هر مرحله به $3n^2 + O(n)$ عملیات اصلی نیاز دارد.

۵. نرخ همگرایی این روش زبرخطی است.

۶. همگرایی سراسری روش $BFGS$ برای توابع اکیدا محدب با جستجوی خطی دقیق و نیز با جستجوی

خطی ولف اثبات شده است [17].

قضیه‌ی زیر یک ویژگی مهم روش $BFGS$ را که حفظ خاصیت معین مثبت بودن ماتریس B_k در هر تکرار می‌باشد را بیان می‌کند.

قضیه ۱-۴-۳: [17] اگر ماتریس B_k معین مثبت باشد و $y_k^T s_k > 0$ ، آن‌گاه B_{k+1}^{BFGS} نیز معین مثبت است.

اثبات: چون ماتریس B_k معین مثبت است لذا دارای تجزیه چولسکی به شکل $B_k = LL^T$ است که در آن L یک ماتریس پایین مثلثی با عناصر قطری ناصفر است. بنابراین با استفاده از این تجزیه داریم

$$B_{k+1} = LL^T - \frac{LL^T s_k s_k^T LL^T}{s_k^T LL^T s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} \quad \blacksquare.$$

تذکر ۲-۴-۴. فرمول‌های بهنگام‌سازی ماتریس هسی که تا کنون بیان گردید مبتنی بر برقراری تساوی

$$B_{k+1} s_k = y_k$$

می‌باشند که از رابطه سکانت به دست می‌آید. بهنگام کردن تقریب‌ها برای وارون هسی نیز امکان‌پذیر است، لذا می‌توان تقریب‌های وارون هسی را به گونه‌ای به دست آورد که در وارون معادله سکانت

$$s_k = G_{k+1}^{-1} y_k,$$

صدق کنند، به نحوی که تقریب $k + 1$ ام از G_{k+1}^{-1} که با H_{k+1} نمایش داده می‌شود، در شرط زیر صادق باشد

$$s_k = H_{k+1} y_k,$$

دو راه برای تبدیل بهنگام‌ها برحسب تقریب هسی B_k به بهنگامی برحسب تقریبی از وارون ماتریس هسی یعنی H_k یا بالعکس وجود دارد، برای هر فرمول بهنگام‌سازی برحسب H_k ، فرمول بهنگام‌سازی برحسب B_k با جابه‌جایی نقش‌های B_k و H_k و هم‌چنین s_k و y_k به دست می‌آید که مکمل گرفتن نامیده می‌شود. راه دیگر استفاده از اتحاد کلی مربوط به وارون‌گیری موسوم به فرمول شرم‌من - موریسون می‌باشد که به صورت زیر است:

$$[A + ab^T]^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1} ab^T A^{-1}}{1 + b^T A^{-1} a},$$

که در آن A یک ماتریس $n \times n$ و a و b بردارهایی n بعدی هستند، می‌باشد. این رابطه در صورت وجود وارون‌ها برقرار می‌باشد.

با وارون گیری از فرمول BFGS بر حسب B به تولید بهنگام BFGS بر حسب H به صورت زیر می توان رسید

$$H_{k+1}^{BFGS} = H_k + \left(\frac{y_k^T H_k y_k}{y_k^T s_k} + 1 \right) \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} - \left(\frac{s_k y_k^T H_k + H_k y_k s_k^T}{y_k^T s_k} \right).$$

تذکره ۲-۴-۵: در طی چند دهه ی گذشته تحلیل های متعددی در مورد همگرایی روش BFGS بر روی مسائل مینیم سازی محدب صورت گرفته است. به عنوان مثال ثابت شده است که روش BFGS برای توابع محدب همگرایی سراسری و همچنین تحت شرایطی همگرایی زبرخطی دارد [25]. درمقابل اطلاعات زیادی در مورد همگرایی سراسری این روش برای مسائل نامحدب در دسترس نبود. در سال ۲۰۰۱ لی و فوکوشیما با ارائه یک روش BFGS اصلاح شده، توانستند همگرایی سراسری این روش را بدون فرض محدب بودن تابع هدف اثبات کنند [12].

۲-۵ روش BFGS بدون حافظه

یکی از مشکلات روش های شبه نیوتن نیاز به ذخیره سازی ماتریس B_k است، جاییکه ذخیره سازی ماتریس B_k نیاز به زمان و هزینه زیادی دارد. برخی دانشمندان برای غلبه بر این مشکل و به منظور افزایش کارایی روش های شبه نیوتن ردهای جدید از روش های شبه نیوتن موسوم به روش های شبه نیوتن بدون حافظه را ارائه نمودند. در این روش ها سعی بر این است که اطلاعات نگهداری نشود و ماتریس بهنگام مستقیما از تقریب اولیه $H_0 = I$ محاسبه شود. روش های شبه نیوتن بدون حافظه انواع مختلفی دارند. در اینجا به روش BFGS بدون حافظه می پردازیم.

روش شبه نیوتن (۲-۴-۳-۱) را در نظر بگیرید که در آن H_{k+1} با قرار دادن $H_k = I$ به جای H_k در فرمول بهنگام سازی BFGS تعریف می شود. بنابراین H_{k+1} بدون ارجاع به H_k قبلی تعیین می گردد و این فرایند بهنگام سازی بدون حافظه است. ماتریس بهنگام در این فرآیند از رابطه ی زیر محاسبه می گردد

$$H_{k+1}^{BFGS} = I + \left(1 + \frac{y_k^T y_k}{y_k^T s_k} \right) \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} - \left(\frac{s_k y_k^T + y_k s_k^T}{y_k^T s_k} \right). \quad (9-2)$$

برای بدست آوردن جهت d_k ابتدا با کاهش یک واحدی اندیس ها (۲-۹) و مرتب کردن عبارت خواهیم داشت

$$H_k = \left(I - \frac{s_{k-1} y_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right) \left(I - \frac{y_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right) + \frac{s_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}}, \quad (10-2)$$

که در آن I ماتریس همانی است. برای به دست آوردن جهت d_k کفایت که H_k را در رابطه $d_k = -H_k g_k$ قرار دهیم.

$$d_k = -g_k + \left(\frac{g_k^T y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{y_{k-1}^T y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \frac{g_k^T s_{k-1}}{(s_{k-1}^T y_{k-1})^2} \right) s_{k-1} + \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} (y_{k-1} - s_{k-1}),$$

از $s_{k-1} = \alpha_{k-1} d_{k-1}$ فرمول فوق را می توان به صورت زیر تبدیل نمود:

$$d_k = -g_k + \left(\frac{g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{\|y_{k-1}\|^2 g_k^T d_{k-1}}{(d_{k-1}^T y_{k-1})^2} \right) d_{k-1} + \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}} (y_{k-1} - s_{k-1}), \quad (11-2)$$

اگر از جستجوی خطی دقیق استفاده کنیم رابطه معادل با $d_{k+1} = -g_{k+1} + \left(\frac{y_k^T g_{k+1}}{d_k^T y_k} \right) d_k$ می‌باشد که این دقیقاً با روش گرادیان مزدوج LS مطابقت دارد که معادل با یک پیاده سازی متعارف از روش های گرادیان مزدوج با جستجوی خطی دقیق است که در فصل بعدی ارائه می‌گردد.

می‌توان با استفاده از (۲-۱۰) این الگوریتم را بدون جستجوی خطی دقیق در شکلی مشابه روش های گرادیان مزدوج به کار گرفت. این کار تنها نیاز به ذخیره سازی همان بردارهای مورد نیاز برای روش های گرادیان مزدوج دارد. اما با توجه به نظریه روش های شبه نیوتن می‌توان انتظار داشت که در صورت نادقیق بودن جستجوی خطی این شکل جدید برتر باشد و در واقع تجربیات عملی نیز مؤید این است [16].

۲-۶ بررسی دو خانواده از روش های سکانت اصلاح شده

با توجه به ویژگی های روش های شبه نیوتن، می‌توان گفت این روش ها در میان روش های موجود برای حل مسائل مینیمم سازی نامقید، از زمره روش های تکراری محبوب و پرطرفدار هستند که از خصوصیات مطلوب این روش های تکراری می‌توان به دقت خوب و سرعت همگرایی آن‌ها اشاره کرد.

با اینکه معادله سکانت نقش اصلی در تشکیل تقریب های ماتریس هسی و تعیین شرایطی که ماتریس های بهنگام باید در آن صدق کنند، ایفا می‌کند اما این شرط یک نقص عمده دارد و آن این است که تنها از اطلاعات مربوط به گرادیان استفاده می‌کند. این امر سبب شد که دسته‌ای از پژوهشگران برای بهبود شرایط همگرایی اصلاحاتی بر شرط سکانت اعمال کنند تا علاوه بر اطلاعات مربوط به گرادیان، اطلاعات مربوط به تابع هدف نیز برای بهنگام سازی منظور شود. در این بخش نمونه هایی از شرایط سکانت اصلاح شده در این زمینه را بیان می‌کنیم.

۲-۶-۱ روش سکانت اصلاح شده لی و فوکوشیما^۷

در سال ۲۰۰۱ لی و فوکوشیما [12] به منظور بهبود شرایط همگرایی روش $BFGS$ ، به اصلاح معادله سکانت (۲-۴) پرداختند. آن‌ها با استفاده از معادله ی سکانت، فرمول بهنگام روش $BFGS$ را به صورت زیر اصلاح کردند و آن را روش $MBFGS$ نامیدند.

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k^* y_k^{*T}}{y_k^{*T} s_k}, \quad (12-2)$$

که در آن

$$B_{k+1} s_k = y_k^*, \quad y_k^* = y_k + r_k s_k. \quad (13-2)$$

⁷ Li and Fukushima

آن‌ها با تعریف پارامتر $\eta_k = y_k^T s_k / \|s_k\|^2$ و تحت شرط پیوستگی لیپ‌شیتز روی g ثابت کردند که اگر r_k به گونه‌ای انتخاب گردد که برای یک $\epsilon > 0$ داشته باشیم

$$\forall k \geq 1, \quad \eta_k + r_k \geq \epsilon,$$

یعنی $\{\eta_k + r_k\}$ از پایین کراندار باشد، آنگاه روش $MBFGS$ تحت شرایط مناسب بدون فرض محدب بودن تابع هدف دارای همگرایی سراسری است.

به علاوه نشان دادند اگر $\{r_k\}$ در رابطه‌ی زیر صدق کند

$$\sum_{k=0}^{\infty} r_k < \infty$$

نرخ همگرایی زیرخطی است.

۲-۶-۲ روش سکانت اصلاح شده ژانگ و ژو^۸

در سال ۲۰۰۶ ژانگ و ژو [28] در راستای یافتن یک شرط سکانت اصلاح شده با رفتار همگرایی مناسب برای توابع نامحدب، شرط سکانت ارائه شده لی و فوکوشیما را با اندکی تغییر به صورت زیر اصلاح نمودند

$$B_{k+1} s_k = z_k, \quad z_k = y_k + h_k \|g_k\|^r s_k, \quad (14-2)$$

که در آن $r > 0$ و به ازای ثابت $c > 0$ ، h_k به صورت زیر تعریف می‌گردد

$$h_k = c + \max \left\{ -\frac{y_k^T s_k}{\|s_k\|^2}, 0 \right\} \|g_k\|^{-r}.$$

مزیت بهنگام سازی $BFGS$ حاصل از (۱۴-۲) این است که مستقل از نوع جستجوخطی استفاده شده همواره داریم

$$s_k^T z_k = s_k^T y_k + c \|g_k\|^r \|s_k\|^2 + \max \left\{ -\frac{y_k^T s_k}{\|s_k\|^2}, 0 \right\} \|s_k\|^2 \geq c \|g_k\|^r \|s_k\|^2 > 0,$$

رابطه بالا تضمین می‌کند که ماتریس B_{k+1} حاصل از این بهنگام، همواره خاصیت معین مثبت بودن B_k را به ارث می‌برد. همچنین در صورت استفاده از شرایط جستجوخطی قوی ولف داریم

$$s_k^T y_k = s_k^T g_{k+1} - s_k^T g_k \geq \sigma s_k^T g_k - s_k^T g_k = -(1 - \sigma) s_k^T g_k > 0.$$

در نتیجه $h_k = 0$ ، بنابراین معادله سکانت (۱۴-۲) به معادله زیر تبدیل می‌شود

$$B_{k+1} s_k = z_k, \quad z_k = y_k + c \|g_k\|^r s_k \quad (15-2)$$

ژانگ و ژو با استفاده از شرط سکانت اصلاح شده (۱۵-۲) یک پارامتر جدید برای روش‌های گرادیان مزدوج ارائه کردند، که در فصل سوم این روش را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

⁸ Zhang and Zhou

فصل سوم
روش گرادیان مزدوج

۳-۱ مقدمه

روش‌های گرادیان مزدوج از دیر باز به عنوان یک خانواده‌ی بسیار مهم از روش‌ها برای حل سیستم‌های معادلات خطی و مسائل برنامه ریزی غیرخطی در مقیاس بزرگ مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این روش‌ها به دلیل عدم نیاز به اطلاعات ماتریس هسی، استفاده کم از حافظه ماشین و خواص همگرایی موضعی و سراسری مناسب، به روش‌های بسیار مطلوب برای حل مسائل بهینه‌سازی نامقید در مقیاس بزرگ تبدیل شده‌اند.

روش گرادیان مزدوج خطی برای نخستین بار در سال ۱۹۵۲ توسط هستنس^۹ و استفل^{۱۰} به عنوان یک روش تکراری برای حل دستگاه‌های متقارن و معین مثبت پیشنهاد شد [11]. به دنبال آن، این سؤال مطرح شد که آیا می‌توان برای حل مسائل بهینه‌سازی توابع محدب یا حتی توابع غیرخطی عمومی از ایده گرادیان مزدوج خطی بهره گرفت؟ در پاسخ به این سؤال در سال ۱۹۶۴ فلچر^{۱۱} و ریوز^{۱۲}، اولین روش گرادیان مزدوج غیرخطی را معرفی نمودند، سپس با استفاده از ایده‌ی اولیه‌ی آن‌ها الگوریتم‌های بسیاری پیشنهاد شد که برخی از آن‌ها به‌طور وسیعی در عمل مورد استفاده قرار گرفتند [9].

۳-۲ روش گرادیان مزدوج (CG)

روش‌های جهت مزدوج ابتدا در جهت حل برای مسئله‌ی درجه دوم به شکل

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x,$$

که در آن Q یک ماتریس متقارن معین مثبت $n \times n$ است ابداع شده و مورد تحلیل قرار گرفته‌اند، و سپس برای حل مسائل غیرخطی تعمیم داده می‌شوند. اینگونه استدلال می‌شود که چون هر مسئله‌ای در نزدیکی جواب تقریباً از درجه دوم است، رفتار همگرایی مشابه رفتار همگرایی در مسائل کاملاً درجه دوم می‌باشد.

تعریف ۳-۱-۱: [16] برای یک ماتریس متقارن Q ، بردارهای d_1 و d_2 را Q -متعامد یا مزدوج نسبت به Q نامند اگر

$$d_1^T Q d_2 = 0,$$

اگر $Q = I$ ، آنگاه مزدوج بودن معادل مفهوم معمول تعامد است.

تعریف ۳-۱-۲: [16] برای یک ماتریس متقارن Q ، مجموعه متناهی از بردارهای d_1, d_2, \dots, d_n را یک مجموعه Q -مزدوج نامند اگر به ازای هر $j \neq i$ داشته باشیم

⁹ Hestens

¹⁰ Stiefel

¹¹ Fletcher

¹² Reeves

$$d_i^T Q d_j = 0,$$

می توان نشان داد که اگر Q معین مثبت و مجموعه بردارهای غیر صفر $d_1, d_2, \dots, d_n, -Q$ متعامد باشند، آن گاه این بردارها مستقل خطی اند.

تعریف ۳-۱-۳: اگر در الگوریتم کاهش، جهت های جستجوی d_i طوری انتخاب شوند که علاوه بر کاهش بودن نسبت به جهت های قبلی مزدوج باشد، الگوریتم را الگوریتم جهت های مزدوج می نامند.

روش گرادیان مزدوج را می توان حد وسطی بین روش گرادیان و روش نیوتون تصور نمود. ساختار این روش ها بر مزدوج بودن جهت های جستجو استوارند. یکی از ویژگی های مهم روش این است که به محاسبات و ذخیره سازی کمی نیاز دارد.

روش گرادیان مزدوج یک روش جهت های مزدوج با یک ویژگی خاص می باشد و آن این است که در تولید بردارهای جهت، بردار جدید d_k تنها توسط بردار قبلی d_{k-1} محاسبه می شود، و داشتن همه بردارهای قبلی $d_0, d_1, d_2, \dots, d_{k-2}$ از مجموعه مزدوج نیاز نیست. در ادامه به جزئیات روش گرادیان مزدوج می پردازیم. در روش تکراری گرادیان مزدوج جهت جستجوی d_k را می توان توسط فرمول زیر به دست آورد

$$d_k = \begin{cases} -g_k, & k = 0, \\ -g_k + \beta_k d_{k-1}, & k \geq 1. \end{cases} \quad (۱-۳)$$

که در آن برای هر $k \geq 1$ ، جهت d_k یک ترکیب خطی از جهت روش گرادیان یعنی $-g_k$ و جهت قبلی d_k و β_k است که β_k اسکالری است که روش گرادیان مزدوج را توصیف می کند. پارامتر β_k باید به گونه ای تعیین شود که بردارهای d_k و d_{k-1} ، Q متعامد باشد. به سادگی با ضرب رابطه بالا در $d_{k-1}^T Q$ و تحمیل شرط $d_{k-1}^T Q d_k = 0$ ملاحظه می گردد

$$\beta_k = \frac{g_k^T Q d_{k-1}}{d_{k-1}^T Q d_{k-1}},$$

این روش انتخاب جهت در الگوریتم گرادیان مزدوج سه ویژگی بزرگ دارد

۱. یک ویژگی مهم روش گرادیان های مزدوج این است که فرمول برای تعیین بردار جهت جدید به کار گرفته فرمول ساده ای است و این روش تنها اندکی پیچیده تر از روش گرادیان می باشد.

۲. به استثنای مواردی که جواب در کمتر از n مرحله به دست آید، گرادیان همواره ناصفر و نسبت به همه جهات قبلی مستقل خطی است. در واقع گرادیان g_k بر زیر فضای B_k تولید شده از d_0, d_1, \dots, d_{k-1} عمود است. اگر جواب در کمتر از n مرحله به دست آید، گرادیان صفر می شود و فرآیند به پایان می رسد و لزومی برای پیدا کردن جهت جدید باقی نمی ماند.

۳. به دلیل آنکه جهت‌ها به گرادیان وابسته هستند، فرآیند مربوط در هر مرحله پیشرفت خوب و یکنواختی به سوی جواب دارد. این در نقطه مقابل وضعیت ناشی از انتخاب‌های جهت‌های مزدوج اختیاری است که در آن‌ها پیشرفت مراحل قبل از چند مرحله نهایی ممکن است کند باشد. گرچه پیشرفت یکنواخت برای مسئله درجه دوم از اهمیت زیادی برخوردار نیست، اما برای تعمیم به مسائل غیردرجه دوم مهم است [16].

شکل کلی الگوریتم گرادیان مزدوج برای مسائل درجه دوم به صورت زیر است.

| الگوریتم ۳-۱ (روش‌های گرادیان مزدوج) |
|---|
| <p>ورودی: بردار آغازین $x_0 \in R^n$</p> <p>گام (۰): قرار ده $k = 0$ و محاسبه کن</p> $d_0 = -g_0 = b - Qx_0.$ <p>گام (۱): تا زمانی که $g_k \neq 0$ مراحل زیر را دنبال کن.</p> <p>گام (۲): α_k را از رابطه زیر محاسبه کن</p> $\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T Q d_k}.$ <p>گام (۳): قرار ده</p> $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k,$ <p>گام (۴): محاسبه کن</p> $g_{k+1} = Qx_{k+1} - b,$ $\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T Q d_k}{d_k^T Q d_k},$ <p>جهت جستجو را از رابطه‌ی زیر محاسبه کن</p> $d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k.$ <p>گام (۵): قرار ده $k = k + 1$ و به گام (۱) برو.</p> |

برای اثبات آنکه روش گرادیان مزدوج یک روش جهت مزدوج است، لازم است که Q - مزدوج بودن بردارهای d_k نشان داده شود. قضیه‌ی زیر به بیان این ویژگی و دیگر خواص مهم روش گرادیان مزدوج می‌پردازد.

قضیه ۳-۲-۱: (قضیه گرادیان مزدوج) [16] فرض کنید x_k ، جواب تولید شده توسط الگوریتم گرادیان مزدوج در تکرار k ام باشد که با جواب بهینه x^* یکسان نیست. آن‌گاه داریم:

$$\text{span}\{g_0, g_1, \dots, g_k\} = \text{span}\{g_0, Qg_0, \dots, Q^k g_0\} \quad (۱)$$

$$\text{span}\{d_0, d_1, \dots, d_k\} = \text{span}\{g_0, Qg_0, \dots, Q^k g_0\} \quad (۲)$$

$$d_k^T Q d_i = 0, \quad \forall i \leq k-1 \quad (۳)$$

$$\alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{d_k^T Q d_k} \quad (۴)$$

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k} \quad (5)$$

قسمت‌های (۱) و (۲) این قضیه بیانی از ارتباط بین بردارهای جهت و گرادیان است. این که روش، یک روش جهت مزدوج است با تساوی قسمت (۳) محقق می‌شود. قسمت‌های (۴) و (۵)، فرمول‌های دیگری برای α_k و β_k پیشنهاد می‌دهند که معمولاً مناسب‌تر از فرمول‌های اولیه می‌باشند.

نتیجه ۳-۲-۱: [16] از قضیه فوق می‌توان نتیجه گرفت که در روش گرادیان مزدوج

$$\forall i = 0, 1, \dots, k-1 \quad g_k^T g_i = 0.$$

شکل استاندارد الگوریتم گرادیان مزدوج به صورت زیر می‌باشد.

الگوریتم ۳-۲ (الگوریتم روش‌های گرادیان مزدوج)

ورودی: بردار آغازین $x_0 \in R^n$.

گام (۰): قرار ده $k = 0$ و محاسبه کن

$$d_0 = -g_0 = b - Qx_0.$$

گام (۱): تا زمانی که $g_k \neq 0$ مراحل زیر را دنبال کن.

گام (۲): α_k را از رابطه زیر محاسبه کن.

$$\alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{d_k^T Q d_k}.$$

گام (۳): قرار ده

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

گام (۴): محاسبه کن

$$g_{k+1} = g_k + \alpha_k Q d_k,$$

$$\beta_{k+1} = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k},$$

جهت جستجو را از رابطه‌ی زیر محاسبه کن

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k.$$

گام (۵): قرار ده $k = k + 1$ و به گام (۱) برو.

۳-۳ روش گرادیان مزدوج غیرخطی

در بخش قبل ملاحظه شد که روش گرادیان مزدوج به عنوان یک الگوریتم مینیمم سازی برای حل یک مسئله توابع مجذوری محدب به شکل زیر در نظر گرفته شد

$$\min \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x. \quad (۲-۳)$$

در ادامه به حل مسائل بهینه سازی توابع محدب عمومی یا حتی توابع غیرخطی عمومی با استفاده از این روش می پردازیم.

تا به حال روش های گرادیان مزدوج متفاوتی ارائه شده اند که تفاوت اصلی آنها در محاسبه پارامتر β_k می باشد. یک رده مهم از روش گرادیان مزدوج، روش گرادیان مزدوج غیرخطی می باشد. از جمله روش های غیرخطی می توان به روش FR اشاره کرد که در سال ۱۹۶۴ توسط فلچر و ریوز ارائه شد، آنها نشان دادند که با ایجاد دو تغییر ساده در الگوریتم گرادیان مزدوج، چنین تعمیمی امکان پذیر است و بدین ترتیب اولین روش گرادیان مزدوج غیرخطی ارائه شد، که یک نقطه ی عطف در زمینه بهینه سازی غیرخطی در ابعاد بزرگ بود [8].

در این رده از الگوریتم های گرادیان مزدوج، دنباله x_k از فرمول تکراری

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad (۳-۳)$$

محاسبه می گردد که در آن طول گام α_k حاصل از یکی از روش های جستجوی خطی می باشد، و جهت جستجوی d_k از (۳-۱) به دست می آید.

در ادامه به چند روش گرادیان مزدوج غیرخطی می پردازیم.

۳-۳-۱ روش گرادیان مزدوج فلچر-ریوز (FR)

در سال ۱۹۶۴ فلچر و ریوز نشان دادند که با ایجاد این دو تغییر ساده در الگوریتم CG به صورت زیر می توان الگوریتم گرادیان مزدوج را به توابع غیرخطی عمومی تعمیم داد.

(۱) به جای انتخاب طول گام دقیق α_k در گام (۲) الگوریتم (۳-۲)، یک جستجوی خطی تقریبی را در جهت d_k جایگزین کردند.

(۲) گرادیان تابع غیرخطی f به جای گرادیان تابع مجذوری f در نظر گرفتند.

بر اساس این تغییرات آنها اولین الگوریتم گرادیان مزدوج غیرخطی موسوم به الگوریتم FR به صورت زیر، ارائه نمودند.

الگوریتم ۳-۳ (الگوریتم گرادیان مزدوج FR)

ورودی: بردار آغازین $x_0 \in R^n$

گام (۰): بردار $d_0 = -\nabla f(x_0)$ را محاسبه کن و قرار بده $k = 0$.

گام (۱): تا زمانی که $g_k \neq 0$ مراحل زیر را دنبال کن.

گام (۲): α_k را از طریق یک جستجوی خطی محاسبه کن و قرار بده $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

گام (۳): $g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$ را محاسبه کن.

گام (۴): جهت جستجوی خطی d_{k+1} را از رابطه‌ی (۳-۱) محاسبه کن که در آن

$$\beta_{k+1}^{FR} = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k}.$$

گام (۵): قرار بده $k = k + 1$ و به گام (۱) برو.

اگر تابع f یک تابع مجذوری اکیدا محدب باشد و α_k از جستجوی خطی دقیق به دست آید آنگاه روش گرادیان مزدوج FR به روش گرادیان مزدوج خطی ساده (CG) تبدیل می شود. در هر تکرار الگوریتم FR فقط به ارزیابی تابع هدف و گرادینش نیاز دارد، هیچ عملیات ماتریسی انجام نمی شود. تنها ذخیره‌ی تعداد کمی از بردارها مورد نیاز است. لذا الگوریتم برای مسائل بهینه‌سازی نامقید در ابعاد بزرگ بسیار مطلوب عمل می کند.

تحقیقات بسیاری در زمینه بررسی خواص همگرایی روش FR صورت گرفته است. در سال ۱۹۷۰، زوتندیک^{۱۳} ثابت کرد که روش FR با جستجوی خطی دقیق برای توابع غیرخطی عمومی همگرایی سراسری دارد [31]. در سال ۱۹۸۵، البالی^{۱۴} همگرایی سراسری روش FR را برای توابع عمومی با جستجوی خطی ولف، با شرط $\sigma < \frac{1}{2}$ اثبات نمود [1]. اما با وجود نتایج قوی همگرایی که تاکنون برای روش FR ارائه شده است، نتایج عددی به دست آمده نشانگر این موضوع است که روش FR حتی با جستجوی خطی دقیق، ممکن است دور از جواب کند عمل کند، این می تواند به این دلیل باشد هنگامی که طول گام‌ها کوچک می شوند این رفتار برای تعداد بسیاری از تکرارها ادامه می یابد، مگر این که در روند الگوریتم یک شروع مجدد^{۱۵} ایجاد شود [22].

¹³ Zoutendijk

¹⁴ Al-Baali

¹⁵ Restart

۳-۲ روش گرادیان مزدوج پولاک-ریبیر - پولیاک (PRP)

یکی دیگر از روش های گرادیان مزدوج معروف روش گرادیان مزدوج PRP می باشد که نخستین بار در سال ۱۹۶۴ توسط پولاک^{۱۶} و ریبیر^{۱۷} [19]، برای حل مسائل بهینه سازی غیرخطی ارائه شد و سپس در سال ۱۹۶۹ توسط پولیاک^{۱۸} اصلاح گردید [20]. در این روش پارامتر β_k به صورت زیر

$$\beta_{k+1}^{PRP} = \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|g_k\|^2}, \quad (4-3)$$

محاسبه می گردد، که در آن $y_k = g_{k+1} - g_k$

الگوریتم گرادیان مزدوج با انتخاب این β_k ، به الگوریتم گرادیان مزدوج PRP معروف گردید. نتایج عددی نشان داده اند که روش PRP در عمل بسیار بهتر از روش FR رفتار می کند، دلیل این رفتار می تواند این واقعیت باشد که اگر در روند روش PRP یک جهت نامناسب اتفاق بیفتد، بردار $s_k = x_{k+1} - x_k$ کوچک می گردد. در این حالت $g_{k+1} \approx g_k$ ، بنابراین y_k به سمت صفر میل می کند و β_{k+1}^{PRP} بسیار کوچک می گردد، نتیجه این کوچک شدن این است که $d_{k+1} \approx -g_{k+1}$.

این انتخاب بدان معناست که در الگوریتم PRP در حالات مشکل ساز یک شروع مجدد به طور خودکار رخ می دهد [23]. بنابراین روش PRP معمولاً از رفتارهای ناکارآمد پیش آمده برای روش FR (از جمله کند شدن روند الگوریتم) جلوگیری می کند و به عنوان یکی از موثرترین روش های گرادیان مزدوج شناخته شده می باشد.

در سال ۱۹۶۹ پولاک و ریبیر همگرایی سراسری روش PRP را برای توابع اکیدا محدب با جستجوی خطی دقیق ثابت کردند [20]. در سال ۱۹۷۷ پاول^{۱۹} [22] نشان داد که روش PRP تحت سه شرط زیر برای توابع غیرخطی عمومی دارای خاصیت همگرایی سراسری می باشد.

(۱) طول گام s_k به سمت صفر میل کند.

(۲) α_k از جستجوی خطی دقیق به دست آید.

(۳) تابع گرادیان در شرایط لیپ شیتز صادق باشد.

در سال ۱۹۸۴ پاول با ارائه مثالی برای توابع نامحدب با جستجوی خطی دقیق نشان داد که روش PRP ممکن است بدون اینکه به سمت جواب میل کند، در یک دور نامتناهی قرار بگیرد. به این معنی می باشد که روش PRP برای

¹⁶ Polak

¹⁷ Ribiere

¹⁸ Polyak

¹⁹ Powell

توابع عمومی خاصیت همگرایی سراسری ندارد. به همین دلیل پاول پیشنهاد محدود کردن پارامتر β_k روش PRP به مقادیر نامنفی را ارائه داد.

در سال ۱۹۹۲ گیلبرت^{۲۰} و نوسدال^{۲۱} [10] با استناد بر پیشنهاد پاول و با تکیه بر این موضوع که اگر $\beta_k \geq 0$ انتخاب شود آن گاه می توان تحت شرایطی خاصیت کاهشی بودن الگوریتم را اثبات نمود، روش PRP را به صورت زیر اصلاح نمودند

$$\beta_k^{PRP+} = \text{MAX}\{0, \beta_k^{PRP}\}.$$

الگوریتم گرادیان مرتبط با این انتخاب به الگوریتم PRP^+ معروف است. گیلبرت و نوسدال همگرایی سراسری روش PRP^+ را با جستجوی خطی ولف برای توابع عمومی ثابت کردند. لازم به ذکر است که روش PRP^+ با شرایط جستجوی خطی ولف و یا قوی ولف لزوماً کاهشی بودن جهت d_k را تضمین نمی کند به همین دلیل گیلبرت و نوسدال به منظور اثبات همگرایی سراسری فرض کردند که جهت جستجوی d_k یک جهت کاهشی می باشد.

۳-۳-۳ روش گرادیان مزدوج هستنس - استنفل (HS)

روش گرادیان مزدوج HS در سال ۱۹۵۲ توسط هستنس^{۲۲} و استنفل^{۲۳} به عنوان اولین الگوریتم گرادیان مزدوج خطی ارائه شد [11]. در روش ارائه شده تابع هدف یک تابع مجذوری محدب است و طول گام α_k از طریق جستجوی خطی دقیق محاسبه می شود، پارامتر این روش به صورت زیر است.

$$\beta_{k+1}^{HS} = \frac{g_{k+1}^T y_{k+1}}{d_k^T y_k}, \quad (5-3)$$

الگوریتم گرادیان مزدوج با انتخاب β_k^{HS} به الگوریتم گرادیان مزدوج معروف می باشد. یکی از خواص مهم روش HS این است که این روش مستقل از شرایط جستجوی خطی همواره در شرط مزدوج صدق می کند.

هنگامی که f یک تابع مجذوری اکیدا محدب است و α_k از جستجوی خطی دقیق حاصل می شود و طبق قضیه گرادیان مزدوج، چون گرادیانها دو به دو متعامدند، به سادگی دیده می شود که

$$\beta_k^{HS} = \beta_k^{PRP} = \beta_k^{FR}.$$

بنابراین روش های HS و PRP و FR رفتاری کاملاً مشابه دارند. اما برای توابع عمومی با جستجوی خطی تقریبی ممکن است این روش ها رفتار متفاوتی از یکدیگر ارائه دهند. همچنین هنگامی که f یک تابع عمومی است و α_k از جستجوی خطی دقیق حاصل می شود، β_k روش HS را می توان به صورت زیر اصلاح نمود

²⁰ Gilbert

²¹ Nocedal

²² Hestenes

²³ Stiefel

$$\beta_k^{HS+} = \text{MAX}\{0, \beta_k^{HS}\}, \quad (6-3)$$

که روش گرادیان مزدوج HS^+ نامیده می‌شود. گیلبرت و نوسدال نشان دادند که با اصلاح شرط جستجوی خطی ولف، روش HS^+ برای توابع غیرخطی عمومی همگرایی سراسری دارد [10].

۳-۴ روش های گرادیان مزدوج مبتنی بر شرایط سکانت

در سال ۲۰۰۱ دای^{۲۴} و لیاو^{۲۵} [6] یک ایده دیگر برای روش های گرادیان مزدوج مطرح نمودند. در این روش با استفاده از شرط سکانت و خواص آن پارامتر β_k معرفی می‌شود. این دسته از روش های گرادیان مزدوج معمولاً در شرط مناسبی موسوم به شرط کاهش کافی صدق می‌کنند که اثبات همگرایی سراسری الگوریتم‌ها را ساده تر می‌کنند و نتایج عددی مطلوبی را ارائه می‌دهند. در ادامه این بخش به بیان دو عدد از این روش‌ها می‌پردازیم.

۳-۴-۱ روش گرادیان مزدوج دای-لیاو (DL)

بنابر قضیه گرادیان مزدوج یک دنباله از جهت‌های جستجو تولید می‌گردد که در شرط مزدوج زیر صدق می‌کنند

$$d_i^T G d_j = 0 \quad \forall i \neq j, \quad (7-3)$$

که در آن G ماتریس هسی تابع هدف می‌باشد. همچنین برای توابع عمومی غیرخطی با استفاده از قضیه مقدار میانگین می‌توان نوشت

$$\exists t \in (0,1), \quad d_k^T y_{k-1} = \alpha_{k-1} d_{k-1}^T \nabla^2 f(x_{k-1} + \xi \alpha_{k-1} d_{k-1}) d_{k-1},$$

بنابراین می‌توان شرط (۷-۳) را با شرط مزدوج زیر جایگزین کرد

$$d_k^T y_{k-1} = 0. \quad (8-3)$$

این رابطه همان شرط مزدوج روش های گرادیان مزدوج است. شرایط مزدوج فوق زمانیکه از جستجوی خطی دقیق استفاده کنیم برقرار هستند، اما در عمل از جستجوی خطی تقریبی استفاده می‌شود یعنی

$$g_k^T d_{k-1} \neq 0.$$

پری^{۲۶} [19] با استفاده از معادله سکانت $B_k s_{k-1} = y_{k-1}$ و دستگاه معادلات خطی $B_k d_k = -g_k$ در روش های شبه نیوتن، با افزودن اطلاعات مرتبه دوم تابع هدف به روش گرادیان مزدوج، شرایط زیر را معرفی کرد.

$$d_k^T y_{k-1} = d_k^T B_k s_{k-1} = (B_k d_k)^T s_{k-1} = -g_k^T s_{k-1} \quad (9-3)$$

²⁴ Dai

²⁵ Liao

²⁶ Perry

که در آن ماتریس متقارن معین مثبت هسیان تابع هدف می‌باشد که $s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ و $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$.

واضح است که در صورت استفاده از جستجوی خطی دقیق یعنی

$$g_k^T s_{k-1} = 0,$$

رابطه ی اخیر به رابطه (۸-۳) کاهش می یابد.

بعدها دای و لیائو شرایط پری را به صورت زیر اصلاح کردند

$$d_k^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}, \quad (10-3)$$

که $t \geq 0$ یک اسکالر مثبت می‌باشد. به ازای $t = 1$ شرط (۱۰-۳) با شرط (۹-۳) معادل می‌باشد، که در این صورت روش گرادیان مزدوج حاصل از شرط (۱۰-۳) به طور ضمنی شرط سکانت استاندارد $B_k s_{k-1} = y_{k-1}$ را شامل می‌شود و در نتیجه به روش شبه نیوتن نزدیک است. دای و لیائو برای اطمینان از جهت جستجوی (۱-۳)، صادق در (۱۰-۳) را در شرط مزدوج جدید جایگذاری نمودند

$$(-g_k + \beta_k d_{k-1})^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1} \rightarrow -g_k^T y_{k-1} + \beta_k d_k^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}.$$

پارامتر پیشنهادی آن‌ها برای روش گرادیان مزدوج به صورت زیر می‌باشد

$$\beta_k^{DL} = \frac{g_k^T (y_{k-1} - t s_{k-1})}{d_k^T y_{k-1}} = \beta_k^{HS} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_k^T y_{k-1}}.$$

اگر در روش DL جستجوی خطی دقیق رخ دهد، آن گاه $\beta_k^{DL} = \beta_k^{HS}$. همچنین با توجه به مطالب بیان شده می‌دانیم که در شرایطی مشابه $\beta_k^{HS} = \beta_k^{PRP}$ ، در نتیجه برای توابع عمومی روش DL با جستجوی خطی دقیق مشابه روش PRP عمل می‌کند. به همین منظور دای و لیائو همانند روش PRP برای اطمینان از همگرایی سراسری برای توابع عمومی، با اصلاح کردن β_k به فرم زیر، همگرایی سراسری روش DL^+ را با فرض d_k صادق در شرط کاهش کافی نشان دادند.

$$\beta_k^{DL+} = \text{Max}\{\beta_k^{HS}, 0\} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_k^T y_{k-1}}.$$

دای و کو^{۲۷} همگرایی سراسری این روش را برای توابع هدف دلخواه با جستجوی خطی ولف ثابت کردند [5].

۳-۴-۲ روش گرادیان مزدوج ژانگ و ژو (ZZ)

در سال ۲۰۰۶ براساس ایده‌ی دای و لیائو و نیز یابه^{۲۸} و تاکانو^{۲۹}، ژانگ و ژو با استفاده شرایط سکانت روش $MBFGS$ ، شرط مزدوج و به دنبال آن فرمول β_k ی دیگری را معرفی نمودند و همگرایی سراسری این روش را تحت شرایطی مناسب اثبات کردند [28]. به این ترتیب پارامتر دیگری برای روش‌های گرادیان مزدوج مبتنی بر شرایط سکانت معرفی نمودند.

ژانگ و ژو با استفاده از شرط سکانت اصلاح شده (۲-۱۱) رابطه‌ی زیر را به‌عنوان شرط مزدوج ZZ معرفی نمودند

$$d_k^T z_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}, \quad (11-3)$$

که در آن $t \geq 0$ و $c > 0$ و $z_k = y_k + c \|g_k\|^r s_k$

با توجه به تعریف جهت جستجو در روش گرادیان مزدوج، یعنی رابطه (۳-۱) و با استفاده از شرط مزدوج (۳-۱۱)، پارامتر β_k روش ZZ به‌صورت زیر می‌باشد

$$\beta_k^{ZZ} = \frac{g_k^T (z_{k-1} - t s_{k-1})}{d_{k-1}^T z_{k-1}}. \quad (12-3)$$

قضیه زیر از مهم‌ترین ویژگی‌های روش گرادیان مزدوج ZZ رایان می‌کند. مطابق قضیه زیر روش گرادیان مزدوج ZZ با پارامتر (۳-۱۲) بدون فرض محدب بودن روی تابع f خاصیت همگرایی سراسری دارد.

قضیه ۳-۴-۱: اگر در روش گرادیان مزدوج ZZ جهت جستجوی d_k یک جهت کاهشی و طول گام α_k در شرایط جستجوی خطی ولف صادق باشد آن‌گاه روش دارای خاصیت همگرایی سراسری است، یعنی

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0.$$

اثبات: برای اثبات به [28] رجوع کنید.

تعریف ۳-۴-۱: یک شرط مهم که برای برخی از روش‌های گرادیان مزدوج برقرار است، شرط کاهش کافی می‌باشد که از آن در کنار سایر شرایط جستجوی خطی تقریبی در اثبات همگرایی روش‌های گرادیان مزدوج استفاده می‌کنند. این شرط به‌صورت زیر بیان می‌شود

$$g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2 \quad (13-3)$$

که c یک ثابت مثبت است.

۳-۵ روش‌های گرادیان مزدوج سه جمله‌ای

از آنجا که بسیاری از روش‌های گرادیان مزدوج شرط کاهش کافی را ندارند، تحلیل همگرایی آن‌ها دشوار می‌شود. به منظور تولید جهت‌هایی که در این شرط صدق کنند، روش‌های مختلفی ارائه شده است. از جمله این

²⁸ Yabe

²⁹ Takano

روش‌ها، روش‌های گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای هستند که ضمن تعمیم خواص روش‌های گرادیان مزدوج دو جمله‌ای، به ازای پارامترهای مناسب شرط کاهش کافی را برقرار می‌کنند. این کار با اصلاح جهت جستجوی d_k صورت می‌گیرد. همچنین این روش‌ها جهت‌های جستجوی کاهش را مستقل از جستجوی خطی تولید می‌کنند. قابلیت ترکیب این روش‌ها با سایر روش‌های گرادیان مزدوج مانند روش‌های گرادیان مزدوج طیفی، روش‌های گرادیان مزدوج مبتنی بر شرایط سکانت و... را می‌توان به‌عنوان ویژگی دیگری این روش‌ها در نظر گرفت.

در سال ۱۹۷۲ بیل [3]^{۳۰} از اولین روش‌های گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای را مطرح کرد.

$$d_k = -g_k + \beta_{k-1}d_{k-1} + \theta_{k-1}d_t,$$

جاییکه

$$\beta_{k-1} = \frac{g_k^T(g_{k-1} - g_k)}{d_{k-1}^T(g_{k-1} - g_k)},$$

$$\theta_{k-1} = \begin{cases} \frac{g_k^T(g_{k-1} - g_k)}{d_{k-1}^T(g_{k-1} - g_k)}, & \text{if } k > 1 \\ 0 & \text{if } k \neq t + 1 \end{cases}$$

که در آن d_t یک جهت شروع مجدد است و $1 \leq t \leq k$.

در سال ۲۰۰۶، ژانگ، ژو و لی^{۳۱} بر اساس شرایط سکانت که غالباً در روش شبه نیوتن صدق می‌کند، روش کاهش کافی سه‌جمله‌ای PRP را توسعه دادند [30]. در این روش جهت جستجو به شکل زیر تعریف شده است

$$d_k = -g_k + \beta_k^{PRP} d_{k-1} - \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} y_{k-1}. \quad (۱۴-۳)$$

به همین ترتیب در سال ۲۰۰۹، ژانگ یک روش گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای HS را معرفی کرد [27]. جهت جستجو در روش پیشنهادی آن‌ها به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$d_k = -g_k + \beta_k^{HS} d_{k-1} - \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_k^T y_{k-1}} y_{k-1}, \quad d_0 = -g_0.$$

یک ویژگی قابل توجه روش‌های گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای برقراری شرط کاهش کافی $g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$ است.

³⁰ Beale

³¹ Li

یکی از روش‌های کارا گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای روشی است که در سال ۲۰۱۶ لیو و لی [14] ارائه نمودند، لیو و لی با استفاده از پارامتر β_k پیشنهادی توسط لیو (LCG) [13] یک جهت گرادیان سه‌جمله‌ای به صورت زیر پیشنهاد نمودند

$$\begin{cases} d_0 = -g_0 & \text{if } k = 0, \\ d_k = -g_k + \beta_k^{LCG} s_{k-1} + \theta_k y_{k-1} & \forall k \geq 1. \end{cases} \quad (15-3)$$

در اینجا β_k پارامتر مزدوج و θ_k پارامتر ثابت است که به صورت زیر می‌باشند

$$\theta_k = \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}},$$

$$\beta_k^{LCG} = \frac{1}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \left(y_{k-1} - s_{k-1} - s_{k-1} \frac{\|y_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right)^T g_k.$$

به خوبی می‌دانیم که شرط مزدوج متداول که به صورت زیر می‌باشد

$$d_k^T y_{k-1} = 0.$$

بسته به جستجوی خطی دقیق، یک نقش مهم را در تحلیل همگرایی و محاسبات عددی ایفا می‌نماید. با این حال، به‌طور معمول از جستجوی خطی غیردقیق به‌جای جستجوی خطی دقیق برای بدست آوردن طول گام α_k استفاده می‌شود، که بدین معناست که شرط مزدوج متداول معمولاً حفظ نمی‌شود. در این راستا دای و لیائو [6] شرط مزدوج ضعیف‌تری را برای جستجوی خطی غیردقیق با عنوان شرط مزدوج DL مطرح نمودند، که توسط رابطه زیر تعیین می‌شود

$$d_k^T y_{k-1} = -\xi g_k^T s_{k-1},$$

که در آن $\xi \geq 0$ ، لیو و لی با استفاده از ضرب داخلی y_{k-1} با (15-3) نشان دادند که

$$\begin{aligned} d_k^T y_{k-1} &= -g_k^T y_{k-1} + \frac{1}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \left(y_{k-1} - s_{k-1} - s_{k-1} \frac{\|y_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \right)^T g_k s_{k-1}^T y_{k-1} \\ &+ \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \|y_{k-1}\|^2 = -g_k^T s_{k-1}. \end{aligned}$$

به این معناست که جهت جستجوی پیشنهادی آن‌ها شرط مزدوج DL را داراست.

به‌سادگی می‌توان داد دید که جهت جستجوی d_k در رابطه (15-3) را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد

$$d_k = -M_k g_k$$

که در آن ماتریس M_k به صورت زیر نوشته می شود

$$M_k = I - \frac{s_{k-1}^T y_{k-1} + s_{k-1} y_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \left(1 + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}\right)^T \frac{s_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}},$$

که می توان به صورت

$$M_k = I - \frac{s_{k-1} y_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \left(1 + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}\right)^2 \frac{s_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} - \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (16-3)$$

نوشت. از طرفی می دانیم که برای چهار بردار دلخواه u, v, p, q رابطه ی زیر برقرار است

$$\det(I + pq^T + uv^T) = (1 + q^T p)(1 + v^T u) - (p^T v)(q^T u). \quad (17-3)$$

بسادگی با استفاده رابطه (17-3) و تعریف

$$q = y_{k-1}, p = -\frac{s_{k-1}}{y_{k-1}^T s_{k-1}},$$

$$v = s_{k-1}, u = -\frac{y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{\|y_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T y_{k-1})^2},$$

می توانیم نتیجه بگیریم

$$\begin{aligned} \det(M_k) &= \left(1 - y_{k-1}^T \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}}\right) \left(1 + s_{k-1}^T \left(-\frac{y_{k-1}^T}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{\|y_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T y_{k-1})^2}\right)\right) \\ &\quad - \left(-\frac{s_{k-1}^T}{y_{k-1}^T s_{k-1}} s_{k-1}\right) \left(y_{k-1}^T \left(-\frac{y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} + \frac{\|y_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T y_{k-1})^2}\right)\right). \end{aligned}$$

با یک محاسبه مقدماتی می توان ملاحظه کرد

$$\det(M_k) = \frac{\|s_{k-1}\|^2}{y_{k-1}^T s_{k-1}}.$$

رابطه ی فوق نشان می دهد که ماتریس M_k ماتریس نامنفرد است، که می توان M_k را به عنوان یک ماتریس شبه نیوتن از نوع $BGFS$ بدون حافظه در نظر گرفته شود. بنابراین جهت فوق را می توان در رده روش های شبه نیوتن بدون حافظه قرار داد. بهسادگی می توان نشان داد که جهت فوق در شرایط کاهش کافی مستقل از جستجوی خطی صدق می کند. به دلیل این خاصیت مطلوب در فصل چهارم از ایده ای مشابه به این ایده برای حل سیستم معادلات غیرخطی یکنوا استفاده می گردد.

فصل چهارم

یک روش بدون مشتق مبتنی بر تصویر سه جمله‌ای برای حل معادلات غیرخطی یکنوا

از میان روش‌های تکراری برای حل دستگاه‌های معادلات غیرخطی، روش نیوتن، روش شبه‌نیوتن و روش‌های شبه‌نیوتن اصلاح شده به دلیل همگرایی موضعی سریع، مورد توجه می‌باشند. نقطه ضعف مهم این روش‌ها برای مقادیر بزرگ این است که نیاز به حل دستگاه معادلات خطی با ضرایب ماتریس دارند. به همین منظور برای دستگاه‌های غیرخطی با ساختار خاص مانند دستگاه‌های یکنوا، روش‌های متفاوت و موثری ارائه شده‌است. یکی از مسائل با ساختار خاص دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا است که دارای شکل عمومی زیر است

$$F(x) = 0, \quad x \in R^n. \quad (1-4)$$

که در آن $F: R^n \rightarrow R^n$ یک نگاشت پیوسته و یکنوا می‌باشد. یعنی

$$\forall x, y \in R^n, \quad (x - y)^T (F(x) - F(y)) \geq 0. \quad (2-4)$$

به سادگی می‌توان نشان داد که مجموعه جواب دستگاه‌های یکنوا به شرطی که ناتهی بودن، محدب است. دستگاه‌های یکنوا کاربردهای عملی زیادی در ریاضیات کاربردی دارند. به عنوان مثال، شرایط لازم بهینگی در مسائل محدب قابل تبدیل به یک دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا است. با توجه به ویژگی ساختاری دستگاه‌های معادلات غیرخطی یکنوا، روش‌های مبتنی بر تصویر به عنوان یک دسته از روش‌های کارا برای حل آن‌ها، در دهه اخیر مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. از سولدو^{۳۲} و اسوایتر^{۳۳} می‌توان به عنوان پیشگامان روش‌های مبتنی بر تصویر برای حل دستگاه‌های غیرخطی نام برد. ایده اصلی روش‌های مبتنی بر تصویر یافتن یک ابر صفحه جداکننده تکرار جاری از مجموعه جواب دستگاه در هر مرحله و تولید تقریب جدید با تصویر تقریب قبلی بر ابر صفحه ساخته شده است. ژانگ و ژو در [29] با ترکیب روش‌های مبتنی بر تصویر و گرادیان طیفی یک روش جدید برای حل دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا معرفی کردند، ایده اصلی آن‌ها استفاده از جهت‌های گرادیان طیفی در فرآیند الگوریتم تصویر بود جایکه با این اصلاح بهبود قابل توجهی در الگوریتم بوجود آمد. در سال ۲۰۱۰ یان^{۳۴} و همکاران با بکارگیری دو جهت گرادیان مزدوج HS ، دو روش بدون مشتق برای حل (۱-۴) ارائه نمودند [26].

در این فصل ابتدا به طور مختصر، روش‌های مبتنی بر تصویر مورد بررسی قرار داده و در ادامه یک روش مبتنی بر تصویر جدید که جهت جستجوی LCG [13] را بکار می‌برد مورد بررسی و تحلیل قرار می‌دهیم.

³² Solodov

³³ Svaiter

³⁴ Yan

۴-۲ روش‌های مبتنی بر تصویر

هدف این بخش یک مرور اجمالی از روش‌های مبتنی بر تصویر برای حل یک دستگاه غیرخطی یکنواست. این روش طی یک فرآیند تکراری به دنبال تولید دنباله $\{x_k\}$ همگرا به جواب است. در راستای بیان الگوریتم فرض کنید x_k ، تقریب فعلی برای جواب دستگاه (۴-۱) باشد. اساس کار روش‌های مبتنی بر تصویر برای حل دستگاه‌های غیرخطی یکنوا، تولید یک ابرصفحه جداکننده نقطه x_k از مجموعه جواب‌های دستگاه و استفاده از تصویر متعامد این نقطه روی ابرصفحه جداکننده به عنوان تقریب جدید x_{k+1} می‌باشد. برای این منظور ابتدا جهت d_k به گونه‌ای تعیین می‌شود که برای یک $\delta > 0$ شرط زیر برقرار باشد

$$F(x_k)^T d_k < -\delta \|F(x_k)\|^2, \quad (۳-۴)$$

شرط فوق مشابه شرط کاهش کافی در روش‌های گرادیان مزدوج است. با فرض اینکه جهت d_k در شرط (۳-۴) صادق است و با انجام یک فرآیند جستجو برای یافتن α_k مناسب به گونه‌ای

$$F(z_k)^T (x_k - z_k) > 0, \quad (۴-۴)$$

که در آن $z_k = x_k + \alpha_k d_k$ می‌توان ابرصفحه به صورت زیر معرفی کرد

$$H_k = \{x \in R^n / F(z_k)^T (x - z_k) = 0\}. \quad (۵-۴)$$

به سادگی می‌توان ملاحظه نمود که این ابرصفحه نقطه x_k را به طور اکید از مجموعه جواب (۴-۱) جدا خواهد نمود. در این جهت توجه کنید که با توجه به خاصیت یکنوایی F می‌دانیم برای هر \bar{x} که $F(\bar{x}) = 0$ نتیجه می‌دهد،

$$F(z_k)^T (\bar{x} - z_k) \leq 0$$

و بنابراین x_k و \bar{x} در دو سمت متفاوت ابرصفحه قرار دارند. در روش‌های مبتنی بر تصویر، تکرار بعدی x_{k+1} با تصویر x_k به روی ابرصفحه H_k محاسبه می‌گردد. یعنی قرار می‌دهیم

$$x_{k+1} = P_{H_k}(x_k)$$

به سادگی دیده می‌شود که

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^T (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k). k \quad (۶-۴)$$

از دیدگاه هندسی ایده روش‌های مبتنی بر تصویر بر این واقعیت استوار است که در هر تکرار به وسیله ابرصفحه H_k فضای R^n را به دو نیم فضا تقسیم می‌گردد که یکی از آن‌ها شامل همه جواب‌های دستگاه (۴-۱) و دیگری شامل نقطه x_k است، بنابراین انتظار این است که با تصویر x_k به روی H_k می‌توان به مجموعه

جواب‌های دستگانه نزدیک‌تر گردید و تقریب بهتری برای جواب یافت. بدیهی است که هر اندازه فضای تصویر کوچکتر باشد احتمال اینکه در تکرار بعدی به جواب‌ها نزدیک‌تر شویم بیشتر است.

با توجه به ساختار روش‌های مبتنی بر تصویر و نتایج عددی مرتبط با آن‌ها، بیشتر هزینه محاسباتی، بخصوص تعداد محاسبات توابع، در این روش‌ها مربوط به تولید ابر صفحه جداکننده می‌باشد، که خود وابسته به جهت انتخاب شده و چگونگی یافتن طول گام α_k صادق در (۴-۴) است. بنابراین انتخاب جهت مناسب و استفاده از یک جستجوی خطی مناسب در کاهش هزینه‌های محاسباتی و افزایش کارایی روش‌های مبتنی بر تصویر می‌تواند بسیار موثر باشد. در این روش‌ها، تلاش‌های علمی برای پیدا کردن طول گام α_k ، مانند روش‌های حل مسائل بهینه‌سازی نامقید، منجر به معرفی روش‌های جستجوی خطی نادقیق شده است که مهمترین آنها به صورت زیر است

۱- طول گام α_k ارائه شده توسط ژانگ و ژو [29]، در این روش طول گام α_k به گونه‌ای محاسبه می‌شود که رابطه زیر برقرار گردد

$$-F(z_k)^T d_k \geq \sigma \alpha_k \|d_k\|^2, \quad 0 < \sigma < 1 \quad (7-4)$$

بر این اساس در یک فرآیند بازگشت به عقب^{۳۵} می‌توان α_k را به صورت

$$\alpha_k = \max\{\beta \rho^i \mid i = 0, 1, 2, \dots\} \quad (8-4)$$

تعیین کرد به گونه‌ای که رابطه (۷-۴) برقرار باشد، جاییکه β یک تقریب اولیه برای طول گام می‌باشد. توجه داریم که با این انتخاب واضح است که

$$F(z_k)^T (x_k - z_k) \geq \sigma \alpha_k^2 \|d_k\|^2 > 0 \quad (9-4)$$

و بنابراین شرایط لازم برای بکارگیری در الگوریتم را ایفا می‌نماید.

۲- طول گام α_k ارائه شده توسط سولودو و اسوایتر [24]، در این روش طول گام به گونه‌ای محاسبه می‌شود که رابطه زیر برقرار گردد

$$-F(z_k)^T d_k \geq \sigma \alpha_k \|F(z_k)\| \|d_k\|^2 \quad (10-4)$$

با شیوه بازگشت به عقب α_k به صورت (۸-۴) محاسبه می‌گردد به گونه‌ای که رابطه‌ی (۱۰-۴) برقرار باشد. به راحتی دیده می‌شود اگر d_k در رابطه $F(z_k)^T d_k < 0$ صدق کند، آنگاه نامساوی (۱۰-۴) برای همه‌ی α_k به اندازه کافی کوچک برقرار است. بنابراین α_k می‌تواند توسط رابطه‌ی بازگشتی، مانند گام (۲) الگوریتم (۱-۴)، بدست آمده باشد.

³⁵ Back tracking

ما در این پایان نامه و با توجه به نتایج عددی داده شده در مقالات اخیر جستجوی خطی (۴-۷) را بکار می گیریم. اکنون می توان الگوریتم عمومی روش های مبتنی بر تصویر برای حل دستگاه های غیرخطی را به صورت زیر بیان نمود.

| الگوریتم ۴-۱ (الگوریتم روش های مبتنی بر تصویر) |
|--|
| <p>ورودی: تقریب اولیه $x_0 \in R^n$ و پارامترهای $\rho \in (0,1), \beta \in (0,1), \sigma > 0, \epsilon > 0$</p> <p>گام (۰): قرارداده $k := 0$.</p> <p>گام (۱): اگر $\ F(x_k)\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت، جهت d_k صادق در (۴-۳) را تعیین کن.</p> <p>گام (۲): جستجوی خطی α_k را از رابطه ی</p> $\alpha_k = \max\{\beta\rho^i \mid i = 0,1,2, \dots\}.$ <p>تعیین کن به گونه ای که رابطه</p> $-F(z_k)^T d_k \geq \sigma\alpha_k \ d_k\ ^2, \quad (4-11)$ <p>برقرار باشد.</p> <p>گام (۳): قرار ده $z_k = x_k + \alpha_k d_k$</p> <p>گام (۴): اگر $\ F(z_k)\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت، تقریب جدید را از رابطه (۴-۶) محاسبه کن.</p> <p>گام (۵): قرارداده $k = k + 1$ و به گام ۱ برو.</p> |

همانطور که از ساختار روش های مبتنی بر تصویر پیداست، انتخاب جهت مناسب و محاسبه طول گام اساسی ترین مراحل روش های مبتنی بر تصویر هستند و ساختار روش های مبتنی بر تصویر که تا کنون معرفی شده اند تنها از نظر نحوه انتخاب جهت d_k و محاسبه طول گام α_k با هم متفاوتند.

در بخش بعدی با استفاده از ایده ی لیو و لی در (۳-۵) و تعریف یک جهت مناسب یک الگوریتم موثر از نوع روش های مبتنی بر تصویر برای حل دستگاه معادلات غیرخطی یکنوا ارائه می گردد. سپس همگرایی این الگوریتم مورد تحلیل قرار می گیرد.

۴-۳ الگوریتم مبتنی بر تصویر استفاده کننده از یک جهت گرادیان مزدوج سه جمله ای برای حل معادلات غیرخطی یکنوا

با توجه به ساختار الگوریتم های مبتنی بر تصویر، استفاده از جهات d_k که در شرط کاهش کافی صدق نمایند یکی از معیارهایی است که می تواند بررسی خواص همگرایی الگوریتم را تسهیل نماید. در این بخش با استفاده از ساختار مشابه با روش گرادیان مزدوج (۳-۵) و ترکیب آن با روش تصویر ارائه شده توسط سولودو و اسوایتر، الگوریتم موثر برای حل دستگاه های غیرخطی یکنوا ارائه می گردد [14].

در این راستا جهت d_k را به صورت زیر معرفی می کنیم

$$d_k = \begin{cases} -F_k, & \text{if } k = 0 \\ -F_k + \beta_k s_{k-1} + \theta_k \omega_{k-1}, & k \geq 1 \end{cases} \quad (12-4)$$

جاییکه

$$\begin{aligned} s_{k-1} &= x_k - x_{k-1}, \\ \omega_{k-1} &= F_k - F_{k-1} + r s_{k-1}, \\ \theta_k &= t \frac{F_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}}, \end{aligned}$$

که $r > 0$ و $t \in [0, 1)$ یک اسکالر دلخواه است و اسکالر β_k به صورت زیر

$$\beta_k = \frac{1}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} (\omega_{k-1} - s_{k-1} - s_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}})^T F_k, \quad (13-4)$$

تعریف می گردد. قضیه زیر نشان می دهد که جهت تولید شده توسط رابطه (12-4) با $c_1 = (1 - (1+t)^2/4)$ ، در شرایط کاهش کافی صدق می کند.

قضیه 4-3-1: فرض کنید جهت جستجوی d_k تولید شده توسط رابطه (12-4) باشد آنگاه داریم

$$\forall k \geq 0, \quad F_k^T d_k \leq -c \|F_k\|^2. \quad (14-4)$$

اثبات: به استقرا نشان می دهیم رابطه (14-4) برقرار است.

توجه کنید برای $k = 0$ از رابطه (12-4) داریم

$$F_0^T d_0 = -\|F_0\|^2$$

که شرط (14-4) را حفظ می کند.

برای $k \geq 1$ ، با استفاده از ضرب بردار F_k^T در رابطه (12-4) داریم

$$\begin{aligned} F_k^T d_k &= -\|F_k\|^2 + \beta_k F_k^T s_{k-1} + \theta_k F_k^T \omega_{k-1} \\ &= -\|F_k\|^2 + \frac{1}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \left(\omega_{k-1} - s_{k-1} - \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} s_{k-1} \right)^T F_k F_k^T s_{k-1} \\ &\quad + t \frac{F_k^T s_{k-1} F_k^T \omega_{k-1}}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \\ &= \frac{-\|F_k\|^2 (s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2 + (1+t) F_k^T s_{k-1} s_{k-1}^T \omega_{k-1} F_k^T \omega_{k-1}}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2} \end{aligned}$$

$$\frac{\|\omega_{k-1}\|^2 (F_k^T s_{k-1})^2 + (F_k^T s_{k-1})^2 s_{k-1}^T \omega_{k-1}}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2}$$

اکنون با استفاده از نامساوی $2a^T b \leq \|a\|^2 + \|b\|^2$ با قرار دادن

$$a = \frac{1+t}{\sqrt{2}} (s_{k-1}^T \omega_{k-1}) F_k, \quad b = \sqrt{2} (F_k^T s_{k-1}) \omega_{k-1}.$$

با در نظر گرفتن $c_1 = (1 - (1+t)^2/4)$ حال خواهیم داشت

$$F_k^T d_k \leq - \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4}\right) \|F_k\|^2 - \frac{(F_k^T s_{k-1})^2}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})} \leq - \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4}\right) \|F_k\|^2$$

بنابراین اثبات کامل است. ■

با توجه به برقراری رابطه قضیه (۴-۳-۱) واضح است که برای d_k صادق در (۴-۱۴) داریم

$$F_k^T d_k < 0,$$

حال با استفاده از جهت d_k تعریف شده در (۴-۱۲) $z_k = x_k + \alpha_k d_k$ به گونه‌ای است که برای آن داریم

$$F(z_k)^T (x_k - z_k) > 0,$$

از طرفی با استفاده از خاصیت یکنوایی F ، برای هر \bar{x} بطوریکه $F(\bar{x}) = 0$ باشد، می‌توان نتیجه گرفت که

$$F(z_k)^T (\bar{x} - z_k) \leq 0,$$

این بدین معنی است که ابر صفحه

$$H_k = \{x \in R^n \mid F(z_k)^T (x - z_k) = 0\},$$

تکرار کنونی x_k را از جواب سیستم غیرخطی یکنوا معادله (۴-۱) جدا می‌سازد. پس از ایجاد ابر صفحه، نقطه تکرار بعدی x_{k+1} می‌تواند با تصویرسازی x_k در آن محاسبه گردد، یعنی x_{k+1} توسط رابطه زیر به دست می‌آید.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^T (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k). \quad (۴-۱۵)$$

با توجه به مطالب گفته شده، الگوریتم گرادیان مزدوج سه جمله‌ای مبتنی بر تصویر به صورت زیر است

| |
|--|
| الگوریتم ۴-۲ (الگوریتم روش TTDFP) |
| ورودی: نقطه شروع $x_0 \in R^n$ و پارامترهای $t \in [0,1), r > 0, \epsilon > 0, \sigma > 0, \beta \in (0,1]$. |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$. |
| گام (۱): اگر $\ F_k\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت جهت جستجوی d_k را از رابطه زیر محاسبه کن |

$$d_k = \begin{cases} -F_k, & \text{if } k = 0 \\ -F_k + \beta_k s_{k-1} + \theta_k \omega_{k-1}, & k \geq 1 \end{cases} \quad (۱۶-۴)$$

که در آن

$$\begin{aligned} s_{k-1} &= x_k - x_{k-1}, \\ \omega_{k-1} &= F_k - F_{k-1} + r s_{k-1}, \\ \theta_k &= t \frac{F_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}}, \\ \beta_k &= \frac{1}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} (\omega_{k-1} - s_{k-1} - s_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}})^T F_k. \end{aligned} \quad (۱۷-۴)$$

گام (۲): جستجوی خطی α_k را از رابطه‌ی

$$\alpha_k = \max\{\beta^i \mid i = 0, 1, 2, \dots\},$$

تعیین کن به گونه‌ای رابطه‌ی

$$-F(z_k)^T d_k \geq \sigma \alpha_k \|d_k\|^2, \quad (۱۸-۴)$$

برقرار باشد.

گام (۳): قرار ده $z_k = x_k + \alpha_k d_k$.

گام (۴): اگر $\|F(z_k)\| \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر اینصورت تکرار بعدی x_{k+1} از (۱۵-۴) محاسبه کن.

گام (۵): قرار دهید $k = k + 1$ ، به گام (۱) برو.

در قسمت بعدی به بررسی خاصیت همگرایی الگوریتم (۲-۴) پرداخته می‌شود. برای این منظور به دو فرض زیر نیاز داریم. در ادامه این بخش برای راحتی در نوشتار $F(x_k)$ را با F_k نمایش می‌دهیم.

فرض ۱-۳-۴

(H_1) مجموعه جواب $F(x) = 0$ که توسط Ω^* تعریف می‌گردد، ناتهی است.

(H_2) تابع $F: R^n \rightarrow R^n$ ، پیوسته لیب شیتز است. یعنی یک ثابت $L > 0$ وجود دارد بطوریکه

$$\forall x, y \in R^n, \quad \|F(x) - F(y)\| \leq L \|x - y\|.$$

۱-۳-۴ همگرایی سراسری

هدف این بخش اثبات همگرایی سراسری الگوریتم (۲-۴) می‌باشد در این بخش پس از ارائه چند لم مفید قضیه اساسی در مورد همگرایی سراسری را نتیجه می‌گیریم.

در لم‌های زیر، همواره فرض می‌کنیم که فرض (۱-۳-۴) برقرار می‌باشد.

لم زیر یک کران پایین برای طول گام α_k معرفی می‌کند. علاوه بر آن نشان می‌دهد که فرآیند جستجوی خطی خوش تعریف است.

لم ۴-۳-۱: فرض کنید دنباله‌های $\{x_k\}$ و $\{z_k\}$ توسط الگوریتم (۴-۲) تولید شده‌اند، آنگاه داریم

$$\alpha_k \geq \min \left\{ 1, \frac{c\beta \|F_k\|^2}{(L+\sigma)\|d_k\|^2} \right\},$$

اثبات: از فرآیند جستجوی خطی، می‌دانیم که اگر $\alpha_k \neq 1$ باشد، آنگاه $\beta^{-1}\alpha_k$ نمی‌تواند در شرایط جستجوی خطی صدق نماید. بنابراین داریم

$$-F(x_k + \alpha_k \beta^{-1} d_k)^T d_k < \sigma \alpha_k \beta^{-1} \|d_k\|^2,$$

از قضیه (۴-۳-۱) و اضافه و کم کردن جمله $F(x_k + \alpha_k \beta^{-1} d_k)^T d_k$ داریم

$$\begin{aligned} c\|F_k\|^2 &\leq -F(x_k)^T d_k \\ &= (F(x_k + \alpha_k \beta^{-1} d_k)^T d_k - F(x_k)^T d_k) - F(x_k + \alpha_k \beta^{-1} d_k)^T d_k \\ &\leq L\beta^{-1}\alpha_k \|d_k\|^2 + \sigma\beta^{-1}\alpha_k \|d_k\|^2 \end{aligned}$$

که رابطه آخر از شرط لیپ‌شیتز نتیجه شده است. از رابطه اخیر به سادگی می‌توان نتیجه گرفت

$$\alpha_k \geq \frac{c\beta \|F_k\|^2}{(L+\sigma)\|d_k\|^2}.$$

بنابراین اثبات کامل است. ■

لم ۴-۳-۲: فرض کنید تابع F یکنوا باشد و برای هر $x, y \in R^n$ داشته باشیم

$$F(y)^T(x - y) > 0,$$

آنگاه قرار دهید

$$x^+ = x - \frac{F(y)^T(x - y)}{\|F(y)\|^2} F(y)$$

بنابراین برای هر $\bar{x} \in R^n$ به طوری که $F(\bar{x}) = 0$ باشد، خواهیم داشت

$$\|x^+ - \bar{x}\|^2 \leq \|x - \bar{x}\|^2 - \|x^+ - x\|^2.$$

اثبات: با توجه به خاصیت یکنوایی F برای هر $\bar{x} \in R^n$ به طوری که $F(\bar{x}) = 0$ ، داریم

$$F(y)^T(\bar{x} - y) \leq 0,$$

از این نتیجه می‌توان گفت که ابرصفحه

$$H := \{s \in R^n \mid F(y)^T(s - y) = 0\},$$

به طور اکید x را از \bar{x} جدا می‌کند. همچنین به راحتی می‌توان نشان داد که x^+ تصویر x بروی نیم صفحه

$$\{s \in R^n \mid F(y)^T(s - y) \leq 0\}$$

است. از آنجا که \bar{x} متعلق به این فضا است، از خصوصیات اساسی روش تصویر است که

$$(x - x^+)^T(x^+ - \bar{x}) \geq 0.$$

حال خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \|x - \bar{x}\|^2 &= \|x - x^+\|^2 + \|x^+ - \bar{x}\|^2 + 2 \langle x - x^+, x^+ - \bar{x} \rangle \\ &\geq \|x - x^+\|^2 + \|x^+ - \bar{x}\|^2 = \left(\frac{F(y)^T(x - y)}{\|F(y)\|} \right)^2 + \|x^+ - \bar{x}\|^2 \end{aligned}$$

بنابراین اثبات کامل گردید. ■

لم ۴-۳-۳: فرض کنید که دنباله‌های $\{x_k\}$ و $\{z_k\}$ توسط الگوریتم (۲-۴) تولید شده‌اند. آنگاه برای هر \bar{x} بطوریکه $F(\bar{x}) = 0$ باشد، داریم

$$\|x_{k+1} - \bar{x}\|^2 \leq \|x_k - \bar{x}\|^2 - \|x_{k+1} - x_k\|^2, \quad (۲۰-۴)$$

همچنین دنباله $\{x_k\}$ کراندار است و رابطه

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = 0. \quad (۲۱-۴)$$

برقرار است.

اثبات: فرض کنید که $\bar{x} \in \Omega^*$ یک جواب دلخواه از رابطه (۲-۴) باشد، از روابط (۹-۴) و (۱۵-۴) و لم (۲-۳-۴) بدست می‌آوریم

$$\|x_{k+1} - \bar{x}\|^2 \leq \|x_k - \bar{x}\|^2 - \|x_{k+1} - x_k\|^2 \leq \|x_k - \bar{x}\|^2, \quad (۲۲-۴)$$

به این معنی است که دنباله $\{\|x_k - \bar{x}\|^2\}$ یک دنباله کاهشی و بنابراین یک دنباله همگرا می‌باشد. همچنین، می‌توانیم نشان دهیم که دنباله $\{x_k\}$ کراندار است.

از رابطه (۲۲-۴) داریم

$$0 \leq \|x_{k+1} - x_k\|^2 \leq \|x_k - \bar{x}\|^2 - \|x_{k+1} - \bar{x}\|^2,$$

که نشان می‌دهد

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = 0. \quad (۱۹-۴)$$

بنابراین اثبات کامل است. ■

تذکره ۴-۳-۱: بسادگی از روابط (۱۵-۴) و (۱۸-۴) نتیجه زیر به دست می آید

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \frac{|F(z_k)^T(x_k - z_k)|}{\|F(z_k)\|^2} \|F(z_k)\| = \frac{|\alpha_k F(z_k)^T d_k|}{\|F(z_k)\|} \geq c \alpha_k^2 \|d_k\|^2$$

از (۱۹-۴) خواهیم داشت

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0. \quad (۲۳-۴)$$

لم ۴-۳-۴: فرض کنید که دنباله $\{x_k\}$ توسط الگوریتم (۲-۴) تولید شده است، آن گاه جهت جستجوی d_k کراندار می باشد، یعنی یک ثابت $M > 0$ وجود دارد بطوری که

$$\forall k \geq 0, \quad \|d_k\| \leq M.$$

اثبات: از رابطه (۱۵-۴) و نامساوی کوشی - شوارتز داریم

$$\begin{aligned} \|s_{k-1}\| &= \|x_k - x_{k-1}\| \leq \frac{\|F(z_{k-1})\| \|x_{k-1} - z_{k-1}\|}{\|F(z_{k-1})\|^2} \|F(z_{k-1})\| \\ &= \|x_{k-1} - z_{k-1}\| = \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\| \end{aligned}$$

با استفاده از تعریف ω_{k-1} و فرض (H_2) داریم

$$\|\omega_{k-1}\| \leq \|F_k - F_{k-1}\| + r \|s_{k-1}\| \leq (L+r) \|s_{k-1}\| \leq (L+r) \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|. \quad (۲۴-۴)$$

با توجه به کراندار بودن دنباله $\{x_k\}$ و فرض (H_2) ، ثابت $\xi \geq 0$ موجود است بطوری که

$$\forall k \geq 0, \quad \|F_k\| \leq \xi, \quad (۲۵-۴)$$

از سوی دیگر استفاده از روابط (۱۶-۴) - (۱۷-۴) و نامساوی کوشی - شوارتز میتوان نتیجه گرفت

$$\begin{aligned} \|d_k\| &\leq \|F_k\| + |\beta_k| \|s_{k-1}\| + |\theta_k| \|\omega_{k-1}\| \\ &\leq \|F_k\| + \frac{|F_k^T \omega_{k-1}|}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}} \|s_{k-1}\| + \frac{|F_k^T s_{k-1}|}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}} \|s_{k-1}\| \\ &\quad + \frac{|F_k^T s_{k-1}| \|\omega_{k-1}\|^2}{(S_{k-1}^T \omega_{k-1})^2} \|s_{k-1}\| + t \frac{|F_k^T s_{k-1}|}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}} \|\omega_{k-1}\| \\ &\leq \|F_k\| + \frac{\|\omega_{k-1}\| \|F_k\|}{r \|s_{k-1}\|} + \frac{\|F_k\|}{r} + \frac{\|\omega_{k-1}\|^2 \|F_k\|}{r^2 \|s_{k-1}\|^2} + t \frac{\|F_k\| \|\omega_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|} \\ &\leq \|F_k\| + \frac{(L+r) \|F_k\|}{r} + \frac{\|F_k\|}{r} + \frac{(L+r)^2 \|F_k\|}{r^2} + t \frac{(L+r) \|F_k\|}{r} \end{aligned}$$

$$\leq \frac{((3+t)r^2 + L^2 + (3+t)Lr + r)\xi}{r^2} \triangleq M.$$

جاییکه در چهارمین نامساوی از رابطه (۲۴-۴) و برای آخرین نامساوی از رابطه (۲۵-۴) استفاده شده است. ■

تذکره ۲-۳-۴: با تعریف $A = \frac{(3+t)r^2 + L^2 + (3+t)Lr + r}{r^2}$ از لم (۴-۳-۴) داریم

$$\|d_k\| \leq A\|F_k\|$$

این نامساوی در کنار لم (۱-۳-۴) منجر به رابطه زیر می‌گردد

$$\alpha_k \geq \min \left\{ 1, \frac{c\beta}{(L+\sigma)A^2} \right\} \triangleq B > 0. \quad (۲۶-۴)$$

قضیه ۲-۳-۴: فرض کنید که دنباله $\{x_k\}$ توسط الگوریتم (۲-۴) تولید شده است، آن‌گاه داریم

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|F_k\| = 0. \quad (۲۷-۴)$$

اثبات: از قضیه (۱-۳-۴) با استفاده از نامساوی کوشی-شوارتز داریم

$$\|d_k\| \geq c\|F_k\|. \quad (۲۸-۴)$$

با استفاده از روابط (۲۳-۴) و (۲۶-۴) خواهیم داشت

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|d_k\| = 0.$$

که از (۲۸-۴) پیروی می‌کند و نتیجه می‌شود که رابطه (۲۷-۴) برقرار است. ■

فصل پنجم

یک روش بدون مشتق مبتنی بر تصویر سه جمله‌ای طیفی برای حل معادلات غیرخطی یکنوا

همانطور که در فصل قبل گفته شد روش‌های مبتنی بر تصویر یک دسته مهم از روش‌های بدون مشتق برای حل دستگاه‌های معادلات غیرخطی یکنوا به‌ویژه برای مسائل با ابعاد بزرگ می‌باشند. در این فصل یک روش مبتنی بر تصویر جدید که از یک جهت گرادیان مزدوج طیفی استفاده می‌کند مطرح و مورد بررسی قرار می‌گیرد. بررسی خواص همگرایی و مقایسه آن با سایر روش‌های تصویر از سایر اهداف این فصل است. ابتدا در این بخش به‌طور مختصر به بیان روش‌های گرادیان مزدوج طیفی می‌پردازیم.

۵-۲ روش‌های گرادیان مزدوج طیفی

یک خانواده مهم از الگوریتم‌های گرادیان مزدوج، الگوریتم‌های گرادیان مزدوج طیفی (SCG) است. در سال ۲۰۰۱ نخستین بار این خانواده گرادیان مزدوج توسط برگین^{۳۶} و مارتینز^{۳۷} با استفاده از ایده برازیلیا^{۳۸} و بروین^{۳۹} ارائه گردید [4]، آن‌ها با اضافه کردن یک پارامتر مقیاس θ_k جهت جستجو را به‌صورت زیر معرفی نمودند

$$d_{k+1} = -\theta_k g_{k+1} + \beta_k s_k, \quad (1-5)$$

جاییکه $d_1 = -\theta_1 g_1$ و پارامترهای مقیاس θ_k و پارامتر مزدوج β_k به‌صورت زیر محاسبه می‌گردند

$$\theta_k = \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k}, \quad \beta_k = \frac{(\theta_k y_k - s_k)^T g_{k+1}}{s_k^T y_k}.$$

در آن $x_k = x_{k+1} - s_k$ و $y_k = g_{k+1} - g_k$. همانطور که ملاحظه می‌گردد θ_k استفاده شده همان طول گام برازیلیا و بروین است [3].

اگر $\theta_k = 1$ ، آنگاه الگوریتم‌های گرادیان مزدوج استاندارد با توجه به مقدار پارامتر β_k تولید می‌گردد.

گرادیان مزدوج طیفی در سال‌های اخیر مورد توجه محققان قرار گرفته است، از این الگوریتم‌ها نمونه‌های مختلفی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در الگوریتم بخش بعدی از طول گام ارائه شده توسط برازیلیا و بروین به‌عنوان پارامتر طیفی استفاده شده است.

۵-۳ یک جهت گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای طیفی برای حل مسائل بهینه‌سازی نامقید

در سال ۲۰۱۸ پایتینگ و چوانجینگ [18] با افزودن یک پارامتر طیفی به روش گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای ارائه شده توسط لیو و لی جهت جستجوی d_k را به‌صورت زیر ارائه کردند

³⁶ Birgin

³⁷ Martinez

³⁸ Barzilai

³⁹ Borwein

$$\begin{cases} d_0 = -g_0 & \text{if } k = 0, \\ d_k = -\lambda_{k-1}g_k + \beta_k s_{k-1} + \varphi_{k-1}\bar{y}_{k-1} & \forall k \geq 1. \end{cases} \quad (2-5)$$

جاییکه $s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ ، $g_k = \nabla f(x_k)$ و با انتخاب $r \in (0,1)$ داریم

$$\bar{y}_{k-1} = g_k - g_{k-1} + r s_{k-1},$$

و داریم

$$\varphi_{k-1} = \lambda_{k-1}\theta_{k-1},$$

λ_{k-1} یک پارامتر طیفی غیر صفر می باشد که در ادامه معرفی می گردد، β_k پارامتر مزدوج و θ_k پارامتر ثابت است که به صورت زیر پیشنهاد شدند

$$\theta_{k-1} = \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}},$$

$$\beta_k = \frac{1}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \left(\lambda_{k-1} \bar{y}_{k-1} - s_{k-1} - \lambda_{k-1} s_{k-1} \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \right)^T g_k.$$

جهت جستجوی d_k در معادله (2-5) را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد

$$d_k = -N_k g_k$$

که در آن ماتریس N_k به صورت زیر نوشته می شود

$$N_k = \lambda_{k-1} I - \lambda_{k-1} \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1} + s_{k-1} \bar{y}_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \left(1 + \lambda_{k-1} \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \right) \frac{s_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}},$$

به وضوح ماتریس N_k می تواند در فرم زیر در نظر گرفته شود

$$N_k = \lambda_{k-1} B_k,$$

جاییکه

$$B_k = I - \frac{s_{k-1} \bar{y}_{k-1}^T + \bar{y}_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \left(\frac{1}{\lambda_{k-1}} + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \right) \frac{s_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}},$$

که می توان به صورت

$$B_k = I - \frac{s_{k-1} \bar{y}_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \left(\frac{1}{\lambda_{k-1}} + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \right) \frac{s_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} - \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}},$$

نوشت. با استفاده از رابطه (3-17) و تعریف

$$q = \bar{y}_{k-1}, p = -\frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}},$$

$$v = s_{k-1}, u = -\frac{\bar{y}_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{1}{\lambda_{k-1}} \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1})^2},$$

می توانیم نتیجه بگیریم

$$\det(B_k) = \left(1 - \bar{y}_{k-1}^T \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}\right) \left(1 + s_{k-1}^T \left(-\frac{\bar{y}_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{1}{\lambda_{k-1}} \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1})^2}\right)\right) \\ - \left(-\frac{s_{k-1}^T}{\bar{y}_{k-1}^T s_{k-1}} s_{k-1}\right) \left(\bar{y}_{k-1}^T \left(-\frac{\bar{y}_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{1}{\lambda_{k-1}} \frac{s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2 s_{k-1}}{(s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1})^2}\right)\right).$$

با یک محاسبه مقدماتی می توان ملاحظه کرد

$$\det(B_k) = \frac{1}{\lambda_{k-1}} \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}.$$

رابطه‌ی فوق نشان می دهد که ماتریس B_k و بنابراین ماتریس تکراری N_k هر دو ماتریس نامنفرد هستند.

در بخش بعدی ما با ساختار (۲-۵) معادله سکانت شبه نیوتن و شرط مزدوج DL را برای تابع اصلی ثابت می نماییم. پایتینگ و چوانجینگ برای λ_{k-1} یک پیشنهاد به صورت زیر نمودند

$$\lambda_{k-1} = \frac{(s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1})}{(\|s_{k-1}\|^2)},$$

با این پیشنهاد جهت d_k را می توان در فرم زیر

$$d_k = -\frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} g_k + \left(\frac{g_k^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} - \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} - \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2 g_k s_{k-1}^T}{\|s_{k-1}\|^2 \bar{y}_{k-1} s_{k-1}^T}\right) s_{k-1} + \frac{g_k^T s_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \bar{y}_{k-1} \quad (۳-۵)$$

یا فرم تکراری

$$d_k = -N_k g_k,$$

نمایش داد که در آن N_k از رابطه‌ی زیر مشخص می شود

$$N_k = \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} I - \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1} + s_{k-1} \bar{y}_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \left(1 + \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2}{\|s_{k-1}\|^2}\right) \frac{s_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}.$$

توجه کنید که می توان N_k را به عنوان یک ماتریس شبه نیوتن از نوع $BGFS$ بدون حافظه طیفی در نظر گرفته شود. زیرا بسادگی می توان ملاحظه کرد

$$N_k \bar{y}_{k-1} = \left(\frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} I - \frac{s_{k-1} \bar{y}_{k-1}^T}{\|s_{k-1}\|^2} + \frac{s_{k-1} s_{k-1}^T}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} + \frac{s_{k-1}^T s_{k-1} \|\bar{y}_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1} \|s_{k-1}\|^2} \right) \bar{y}_{k-1} - \frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \bar{y}_{k-1}$$

$$= s_{k-1}.$$

بنابراین جهت فوق را می‌توان در رده روش‌های شبه نیوتن بدون حافظه طیفی قرار داد.

از طرف دیگر با استفاده از رابطه (۳-۵) می‌توان نتیجه بگیریم

$$d_k \bar{y}_{k-1} = -\frac{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} g_k^T \bar{y}_{k-1} + \left(\frac{g_k^T \bar{y}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} - \frac{g_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} - \frac{\|\bar{y}_{k-1}\|^2 g_k s_{k-1}^T}{\|s_{k-1}\|^2 s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}} \right) s_{k-1}^T \bar{y}_{k-1}$$

$$+ \frac{g_k^T s_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} \bar{y}_{k-1}^T \bar{y}_{k-1} = -g_k^T s_{k-1}.$$

نشانهگر این است که جهت فوق در شرط مزدوج DL با استفاده از $\xi = 1$ نیز صدق می‌کند. به سادگی می‌توان نشان داد که جهت فوق در شرایط کاهش کافی مستقل از جستجوی خطی صدق می‌کند.

طبق نتایج بالا جهت ارائه شده خواص مطلوبی دارد که در بخش بعدی با استفاده از این ایده و تعریف یک جهت مناسب یک الگوریتم موثر از نوع روش‌های مبتنی بر تصویر برای حل سیستم معادلات غیرخطی یکنوا تعمیم داده می‌شود.

۴-۵ الگوریتم مبتنی بر تصویر استفاده کننده از یک جهت گرادیان مزدوج سه جمله‌ای طیفی برای حل معادلات غیرخطی یکنوا

همانطور که قبلاً اشاره شد با توجه به ساختار الگوریتم‌های مبتنی بر تصویر، استفاده از جهات d_k که در شرط کاهش کافی صدق نمایند یکی از معیارهایی است که می‌تواند بررسی خواص همگرایی الگوریتم‌های مبتنی بر تصویر را تسهیل نماید. از طرفی می‌دانیم برخی از جهات گرادیان مزدوج سه جمله‌ای که برای حل مسائل بهینه‌سازی نامقید ارائه شده دارای خاصیت کاهش کافی می‌باشند، در بخش قبل یک جهت گرادیان مزدوج سه جمله‌ای طیفی با خواص مناسب را مشاهده کردیم. پاتینگ و چوانجینگ [18] با توجه به خواص جهت ارائه شده توسط برازیلیا و بروین جهت d_k به صورت زیر تعریف نمودند

$$d_k = -\lambda_{k-1} F_k + \beta_k s_{k-1} + \varphi_{k-1} \omega_{k-1}, \quad (۴-۵)$$

که در آن داریم

$$\varphi_{k-1} = \lambda_{k-1} \theta_{k-1}, \quad s_{k-1} = x_k - x_{k-1},$$

$$\omega_{k-1} = F_k - F_{k-1} + rS_{k-1},$$

جاییکه $r \in (0,1)$ پارامترهای θ_{k-1} ، λ_{k-1} و β_k به صورت زیر معرفی می گردند

$$\theta_{k-1} = t \frac{F_k^T S_{k-1}}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}},$$

$$\lambda_{k-1} = \frac{(\omega_{k-1} S_{k-1}^T)}{(\|S_{k-1}\|^2)},$$

$$\beta_k = \lambda_{k-1} \frac{\omega_{k-1}^T F_k}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}} - (1 + \lambda_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}})^T \frac{F_k^T S_{k-1}}{S_{k-1}^T \omega_{k-1}}.$$

که در آن $t \in [0,1)$ یک اسکالر دلخواه است، تعریف می گردد.

مشابه فصل قبل در لم ها و قضیه های زیر فرض می کنیم که فرضیات (۴-۳-۱) برقرار است.

لم ۵-۴-۱: فرض کنید که دنباله ی $\{x_k\}$ توسط الگوریتم (۵-۱) تولید شده است، خواهیم آنگاه داریم

$$\forall k \geq 1, \quad r\|s_{k-1}\|^2 \leq S_{k-1}^T \omega_{k-1} \leq (L+r)\|s_{k-1}\|^2.$$

اثبات: به دلیل اینکه $s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ و $\omega_{k-1} = F_k - F_{k-1} + rS_{k-1}$ ، خواهیم داشت

$$S_{k-1}^T \omega_{k-1} = (F_k - F_{k-1})^T (x_k - x_{k-1}) + r\|s_{k-1}\|^2$$

با توجه به یکنوایی F ، داریم

$$S_{k-1}^T \omega_{k-1} \geq r\|s_{k-1}\|^2 > 0,$$

همچنین با فرض (H_2) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} S_{k-1}^T \omega_{k-1} &= (F_k - F_{k-1})^T (x_k - x_{k-1}) + r\|s_{k-1}\|^2 \\ &\leq L\|x_k - x_{k-1}\|^2 + r\|s_{k-1}\|^2 \\ &= (L+r)\|s_{k-1}\|^2. \end{aligned}$$

بنابراین اثبات کامل است. ■

قضیه زیر نشان می دهد که جهت تولید شده توسط رابطه (۵-۴) با $c_1 = (1 - (1+t)^2/4)r$ برای هر $t \in [0,1)$ و $r \in (0,1)$ در شرط کاهش کافی صدق می کند.

قضیه ۵-۴-۱: فرض کنید جهت جستجوی d_k توسط رابطه (۵-۴) تولید شده است، آنگاه داریم

$$F_k^T d_k \leq -c_1 \|F_k\|^2 \quad (۵-۵)$$

اثبات: به استقرا نشان می دهیم رابطه (۵-۵) برقرار است.

توجه کنید برای $k = 0$ از رابطه (۴-۵) داریم

$$F_0^T d_0 = -\|F_0\|^2,$$

که شرط (۵-۵) را ایجاب می کند.

برای $k \geq 1$ ، با استفاده از ضرب بردار F_k^T در رابطه (۴-۵)

$$\begin{aligned} F_k^T d_k &= F_k^T (-\lambda_{k-1} F_k + \beta_k s_{k-1} + \varphi_{k-1} \omega_{k-1}) \\ &= -\lambda_{k-1} \|F_k\|^2 + (1+t)\lambda_{k-1} \frac{F_k^T \omega_{k-1} F_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \\ &\quad - \lambda_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2 (F_k^T s_{k-1})^2}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2} - \frac{(F_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \\ &= -\lambda_{k-1} \left(\frac{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2 \|F_k\|^2 - (1+t) F_k^T \omega_{k-1} F_k^T s_{k-1} s_{k-1}^T \omega_{k-1}}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2} \right) \\ &\quad - \lambda_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2 (F_k^T s_{k-1})^2}{(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2} - \frac{(F_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \end{aligned}$$

اکنون با استفاده از نامساوی $2a^T b \leq \|a\|^2 + \|b\|^2$ و تعریف

$$a = \frac{1+t}{\sqrt{2}} (s_{k-1}^T \omega_{k-1}) F_k, \quad b = \sqrt{2} (F_k^T s_{k-1}) \omega_{k-1}$$

از روابط بالا می توان نتیجه گرفت

$$(s_{k-1}^T \omega_{k-1})^2 \|F_k\|^2 - (1+t) F_k^T s_{k-1} s_{k-1}^T \omega_{k-1} F_k^T \omega_{k-1} + \|\omega_{k-1}\|^2 (F_k^T s_{k-1})^2 \geq c \|F_k\|^2$$

بنابراین خواهیم داشت

$$\begin{aligned} F_k^T d_k &\leq -\lambda_{k-1} \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4} \right) \|F_k\|^2 - \frac{(F_k^T s_{k-1})^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \\ &\leq -\lambda_{k-1} \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4} \right) \|F_k\|^2, \end{aligned}$$

که طبق لم (۵-۴-۱) داریم $\lambda_{k-1} \geq \frac{r \|s_{k-1}\|^2}{(\|s_{k-1}\|^2)} = r > 0$. بنابراین خواهیم داشت

$$-\lambda_{k-1} \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4} \right) \|F_k\|^2 \leq - \left(1 - \frac{(1+t)^2}{4} \right) r \|F_k\|^2.$$

اثبات کامل گردید. ■

از قضیه (۴-۵) واضح است که برای d_k تعریف شده توسط (۴-۵) داریم

$$F_k^T d_k < 0,$$

نتیجه می‌شود که این جهت در فرآیند روش‌های مبتنی بر تصویر قابل استفاده می‌باشد، در نتیجه با استفاده از جهت d_k تعریف شده در (۴-۵) کنار یک فرآیند جستجوی خطی برای یافتن α_k به‌طوریکه در شرط

$$F(z_k)^T (x_k - z_k) > 0$$

صادق باشد، قرار دهید $\alpha_k = \rho^m$ ، در اینجا $\rho \in (0,1)$ یک ثابت است و m کوچکترین عدد صحیح نامنفی می‌باشد به‌طوریکه در

$$-F(z_k)^T d_k \geq \sigma \alpha_k \|d_k\|^2, \quad 0 < \sigma < 1 \quad (۶-۵)$$

صدق کند. سپس داریم

$$F(z_k)^T (x_k - z_k) \geq \sigma \alpha_k^2 \|d_k\|^2 > 0.$$

از طرفی با استفاده از خاصیت یکنوایی F ، برای هر \bar{x} بطوریکه $F(\bar{x}) = 0$ باشد، می‌توان نتیجه گرفت که

$$F(z_k)^T (\bar{x} - z_k) \leq 0,$$

این بدین معنی است که ابر صفحه زیر

$$H_k = \{x \in R^n | F(z_k)^T (x - z_k) = 0\}$$

تکرار کنونی x_k را از مجموعه جوابهای مسئله جدا می‌کند. پس از ایجاد ابر صفحه، نقطه تکرار بعدی x_{k+1} می‌تواند با تصویر سازی x_k در آن محاسبه گردد، یعنی x_{k+1} توسط رابطه زیر به دست می‌آید

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(z_k)^T (x_k - z_k)}{\|F(z_k)\|^2} F(z_k). \quad (۷-۵)$$

با توجه به مطالب گفته شده، الگوریتم مبتنی بر تصویر جدید زیر را برای حل مسائل غیرخطی یکنوا ارائه نمود.

| الگوریتم ۱-۵ | |
|--|-------|
| ورودی: نقطه شروع $x_0 \in R^n$ و پارامترهای $\sigma \in (0,1)$ و $t \in [0,1)$ ، $r \in (0,1)$ ، $\rho \in (0,1)$ ، $\epsilon > 0$. | |
| گام (۰): قرار ده $k = 0$. | |
| گام (۱): اگر $\ F_k\ \leq \epsilon$ توقف کن. در غیر این صورت به گام (۲) برو. | |
| گام (۲): جهت جستجوی d_k را از رابطه زیر محاسبه کن | |
| $d_k = \begin{cases} -F_k, & \text{if } k = 0 \\ -\lambda_{k-1} F_k + \beta_k S_{k-1} + \varphi_{k-1} \omega_{k-1} & k \geq 1 \end{cases}$ | (۸-۵) |

که در آن

$$s_{k-1} = x_k - x_{k-1}, \quad \omega_{k-1} = F_k - F_{k-1} + r s_{k-1},$$

$$\varphi_{k-1} = \lambda_{k-1} \theta_{k-1},$$

$$t_{k-1} = t \frac{F_k^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}}, \quad \lambda_{k-1} = \frac{(\omega_{k-1}^T s_{k-1})}{(\|s_{k-1}\|^2)},$$

و

$$\beta_k = \lambda_{k-1} \frac{\omega_{k-1}^T F_k}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} - (1 + \lambda_{k-1} \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}})^T \frac{s_{k-1}^T F_k}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}}.$$

گام (۳):

الف) از یک فرآیند جستجوی خطی مقدار $\alpha_k = \rho^m$ بگونه‌ای بیابید که m کوچکترین عدد صحیح نامنفی صادق در معادله (۵-۶) است.

ب) قرارده

$$z_k = x_k + \alpha_k d_k.$$

گام (۴): اگر $z_k \in \Omega^*$ ، پس $x_{k+1} = z_k$ ، حل را متوقف کن.

در غیر اینصورت تکرار بعدی x_{k+1} توسط معادله (۵-۷) محاسبه کن.

گام (۵): قرار دهید $k = k + 1$ ، به گام (۱) برو.

در بخش بعدی خواص همگرایی الگوریتم (۵-۱) را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۵-۴-۱ همگرایی سراسری

هدف این بخش اثبات همگرایی سراسری الگوریتم (۵-۱) می‌باشد. در این بخش پس از ارائه چند لم مفید قضیه اساسی، همگرایی سراسری را ارائه می‌دهیم.

تذکر ۵-۴-۱: با در نظر گرفتن قضیه (۵-۴-۱) با نامساوی کشی-شوارتز، خواهیم داشت

$$\|F_k\| \|d_k\| \geq |F_k^T d_k| \geq c_1 \|F_k\|^2,$$

که نشان می‌دهد

$$\|d_k\| \geq c_1 \|F_k\|. \quad (۹-۵)$$

لم زیر یک کران پایین برای طول گام α_k معرفی می‌کند. علاوه بر آن نشان می‌دهد که فرآیند جستجوی خطی خوش تعریف است.

لم ۵-۴-۲: فرض کنید دنباله‌های $\{x_k\}$ و $\{z_k\}$ توسط الگوریتم (۵-۱) تولید شده‌اند. آن‌گاه داریم

$$\alpha_k \geq \min \left\{ \rho, \frac{c_1 \rho \|F_k\|^2}{(L+\sigma) \|d_k\|^2} \right\} \quad (۱۰-۵)$$

اثبات: از فرآیند جستجوی خطی، می‌دانیم که اگر $\alpha_k \neq \rho$ باشد، آنگاه $\alpha_k \rho^{-1}$ نمی‌تواند در شرایط جستجوی خطی صدق نماید. بنابراین خواهیم داشت

$$-F(x_k + \alpha_k \rho^{-1} d_k)^T d_k < \sigma \alpha_k \rho^{-1} \|d_k\|^2,$$

از قضیه (۵-۴-۱) و اضافه و کم کردن جمله $F(x_k + \alpha_k \rho^{-1} d_k)^T d_k$ و بکار بردن شرط لیپ‌شیتز و فرض (H_2) نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \|F_k\|^2 &\leq -F(x_k)^T d_k \\ &= (F(x_k + \alpha_k \rho^{-1} d_k)^T d_k - F(x_k)^T d_k) - F(x_k + \alpha_k \rho^{-1} d_k)^T d_k \\ &\leq L \rho^{-1} \alpha_k \|d_k\|^2 + \sigma \rho^{-1} \alpha_k \|d_k\|^2 \end{aligned}$$

یک نتیجه برای رابطه‌ی فوق این است که

$$\alpha_k \geq \frac{c_1 \rho \|F_k\|^2}{(L + \sigma) \|d_k\|^2},$$

بنابراین اثبات کامل است. ■

لم زیر تکرار لم (۴-۳-۳) می‌باشد که در واقع خاصیت مشترک تمام الگوریتم‌های مبتنی بر تصویر است و مستقل از نحوه تولید ابرصفحه جدا کننده، نشان می‌دهد که فاصله تقریب‌های متوالی تولیدی توسط این الگوریتم‌ها از مجموعه جواب دستگاه معادلات خطی کاهشی است.

لم ۵-۴-۳: فرض کنید دنباله‌های $\{x_k\}$ و $\{z_k\}$ توسط الگوریتم (۵-۱) تولید شده‌اند، آنگاه خواهیم داشت

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \leq \|x_k - x^*\|^2 - \|x_{k+1} - x_k\|^2, \quad \forall x^* \in \Omega^* \quad (۱۱-۵)$$

علاوه بر این، دنباله $\{x_k\}$ کراندار است و حاصل می‌شود

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_{k+1} - x_k\| = 0. \quad (۱۲-۵)$$

تذکر ۵-۴-۲: از لم (۵-۴-۳) داریم

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k \|d_k\| = 0, \quad (۱۳-۵)$$

در واقع باتوجه به پیوستگی تابع F ، بسادگی می‌توان نتیجه گرفت

$$\|x_{k+1} - x_k\| = \frac{|F(z_k)^T (x_k - z_k)|}{\|F(z_k)\|^2} \|F(z_k)\| = \frac{|\alpha_k F(z_k)^T d_k|}{\|F(z_k)\|} \geq c \alpha_k^2 \|d_k\|^2,$$

جاییکه $c = \sigma / M$ و $M = \sup_{k \geq 1} \|F(z_k)\|$.

لم ۵-۴-۴: فرض کنید دنباله‌های $\{x_k\}$ و $\{z_k\}$ توسط الگوریتم (۵-۱) تولید شده‌اند. بنابراین خواهیم داشت

$$\|d_k\| \leq A\|F_k\|, \quad (14-5)$$

از سوی دیگر

$$\alpha_k \geq \min \left\{ \rho, \frac{c_1 \rho}{(L+\sigma)A^2} \right\} \triangleq B, \quad (15-5)$$

در اینجا $A = (2+t)(L+r) + (L+r)^2/r + 1/r$

اثبات: از رابطه (5-7) و نامساوی کشی-شوارتز، داریم

$$\begin{aligned} \|s_{k-1}\| &= \|x_k - x_{k-1}\| & (16-5) \\ &\leq \frac{\|F(z_{k-1})\| \|x_{k-1} - z_{k-1}\|}{\|F(z_{k-1})\|^2} \|F(z_{k-1})\| \\ &= \|x_{k-1} - z_{k-1}\| = \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|. \end{aligned}$$

از رابطه (5-16) و لم (5-4-1) داریم

$$\|\omega_{k-1}\| \leq (L+r)\|s_{k-1}\| \leq (L+r)\alpha_{k-1}\|d_{k-1}\|, \quad (17-5)$$

بنابراین از روابط (5-4) و (5-17)، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \|d_k\| &\leq \frac{\|s_{k-1}\| \|\omega_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|^2} \|F_k\| + \frac{\|\omega_{k-1}\| \|s_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|^2} \|F_k\| & (18-5) \\ &+ \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \|F_k\| + \frac{\|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \|F_k\| + t \frac{\|\omega_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|} \|F_k\| \\ &= (2+t) \frac{\|\omega_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|} \|F_k\| + \left(\frac{\|s_{k-1}\|^2 + \|\omega_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T \omega_{k-1}} \right) \|F_k\| \\ &\leq (2+t) \frac{(L+r)\|s_{k-1}\|}{\|s_{k-1}\|} \|F_k\| \\ &+ \left(\frac{\|s_{k-1}\|^2 + (L+r)^2 \|s_{k-1}\|^2}{r \|s_{k-1}\|^2} \right) \|F_k\| \\ &= \left((2+t)(L+r) + \left(\frac{1}{r} + \frac{(L+r)^2}{r} \right) \right) \|F_k\| \end{aligned}$$

از رابطه (5-18) و لم (5-4-2) داریم

$$\alpha_k \geq \min \left\{ \rho, \frac{c_1 \rho}{(L+\sigma)A^2} \right\} \triangleq B,$$

در اینجا $A = (2+t)(L+r) + \frac{1}{r} + \frac{(L+r)^2}{r}$ اثبات کامل می گردد. ■

تذکره ۳-۴-۵: بنابر فرضیه های لم (۴-۴-۵)، دنباله d_k کراندار می باشد.

اثبات: فرض (H_1) را در نظر می گیریم و x^* را به عنوان یک جواب از F قرار می دهیم، یعنی $F(x^*) = 0$. با در نظر گرفتن فرض (H_2) داریم

$$\|F_k\| = \|F(x_k)\| = \|F(x_k) - F(x^*)\| \leq L\|x_k - x^*\| \leq L\|x_k\| + L\|x^*\|,$$

که نشان می دهد دنباله $\{\|F_k\|\}$ به دلیل کراندار بودن $\{x_k\}$ ، کران دار می باشد.

از رابطه لم (۴-۴-۵) نیز مشاهده می کنیم که دنباله $\{d_k\}$ کراندار است. ■

قضیه ۲-۴-۵: فرض کنید دنباله $\{x_k\}$ توسط الگوریتم (۱-۵) تولید شده است بنابراین خواهیم داشت

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|F_k\| = 0.$$

اثبات: فرض خلف: فرض کنید یک ثابت $\epsilon > 0$ وجود دارد، به طوریکه

$$\forall k \geq 0, \quad \|F_k\| \geq \epsilon,$$

با ترکیب رابطه (۹-۵)، داریم

$$\forall k \geq 0, \quad \|d_k\| \geq c_1 \|F_k\| \geq c_1 \epsilon,$$

از رابطه (۱۳-۵)، خواهیم داشت

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha_k = 0,$$

که با لم (۴-۴-۵) در تناقض است، بنابراین فرض خلف باطل و داریم

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|F_k\| = 0.$$

اثبات تکمیل می گردد. ■

فصل ششم

نتایج عددی

هدف این فصل تحلیل کارایی عددی الگوریتم پیشنهادی فصل چهارم و پنجم در حل دستگاه‌های معادلات غیرخطی می‌باشد.

برنامه کامپیوتری برای پیاده‌سازی الگوریتم‌های موردنظر در محیط نرم‌افزاری *MATLAB 2020* روی یک پردازشگر *PC* با *Intel(R) Core(TM)i7 – 4702MQ CPU @ 2.20 GHz* اجرا گردیده است.

الگوریتم فصل پنجم را در کنار الگوریتم مطرح شده در فصل چهارم روی پنج مسئله شناخته شده از مسائل آزمون که در منابع [14,18] مطرح شده مورد آزمون قرار می‌دهیم. مسائل آزمون در ادامه مطرح می‌گردند. برای مقایسه بهتر، هر الگوریتم را با نقاط اولیه متفاوت به شکل زیر مورد سنجش قرار می‌دهیم، جاییکه نقاط اولیه متناظر با منبع [14] بصورت زیر در نظر گرفته شده است.

$$\begin{aligned} x_1 &= (1, -1, 1, -1, \dots)^T & x_2 &= (1, 1, 1, 1, \dots)^T \\ x_3 &= (10, -10, 10, -10, \dots)^T & x_4 &= (10, 10, 10, 10, \dots)^T \\ x_5 &= \left(\frac{1}{n}, \frac{2}{n}, \frac{3}{n}, \frac{4}{n}, \dots\right)^T & x_6 &= (0.1, 0.1, 0.1, 0.1, \dots)^T \end{aligned}$$

در فرآیند حل مسئله شرط توقف تکرارها برقراری شرط

$$\|F_k\| \leq 10^{-4},$$

می‌باشد. ضمناً اگر در فرآیند حل یک مسئله، نیاز به بیش از ۱۰۰۰۰ تکرار داشته باشیم، فرآیند را خاتمه داده و فرض را بر شکست الگوریتم می‌گذاریم، که چنین حالتی در جداول زیر با عبارت *Fail* نشان داده شده است. در جداول ۱-۵ تعداد تکرارها را با k ، تعداد فراخوانی تابع هدف را با NF و زمان اجرا را با CPU نمایش می‌دهیم.

۶-۲ بررسی نتایج عددی

در این بخش، الگوریتم بدون مشتق مبتنی بر تصویر گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای طیفی را با الگوریتم ارائه شده در فصل چهارم (*TTDFP*) مورد مقایسه قرار می‌دهیم. در ادامه برای بیان نتایج عددی ابتدا مسئله آزمون بیان می‌گردد و سپس نتایج حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله را گزارش می‌کنیم.

مقادیر پارامترهای استفاده شده در الگوریتم به صورت زیر است

$$\epsilon = 10^{-4}, \rho = \frac{2}{5}, \sigma = 10^{-4}, r = 0.01, t = 0.5.$$

همه‌ی مسائل به‌صورت زیر هستند

$$F(x) = 0 \quad x \in R^n,$$

که در آن $F: R^n \rightarrow R^n$ ، که در ابتدای هر مسئله قبل از ارائه نتایج عددی مولفه‌های آن معرفی می‌گردد.

مسئله ۱. در این مسئله مولفه‌های بردار به‌صورت زیر تعریف می‌گردند [18].

$$f_i(x) = \exp x_i - 1, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

نتایج عددی حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله یک در جدول زیر مشاهده می‌گردد.

جدول ۱. نتایج محاسباتی هر دو الگوریتم برای مسئله یک.

| Initial points | Dim | k/CPU /NF | |
|----------------|--------|------------------------|----------------|
| | | الگوریتم (۲-۴) (TTDFP) | الگوریتم (۱-۵) |
| x_1 | 2000 | 18/0.067/73 | 18/0.060/90 |
| | 5000 | 18/0.084/73 | 18/0.090/90 |
| | 20/000 | 19/0.133/77 | 19/0.138/95 |
| | 30/000 | 19/0.151/77 | 19/0.163/95 |
| x_2 | 2000 | 16/0.114/65 | 15/0.100/75 |
| | 5000 | 17/0.161/69 | 16/0.160/80 |
| | 20/000 | 17/0.191/69 | 16/0.182/80 |
| | 30/000 | 18/0.216/73 | 17/0.196/85 |
| x_3 | 2000 | 25/0.076/109 | 31/0.076/178 |
| | 5000 | 25/0.102/109 | 31/0.121/178 |
| | 20/000 | 26/0.173/113 | 32/0.208/183 |
| | 30/000 | 26/0.214/113 | 32/0.261/183 |
| x_4 | 2000 | 19/0.103/87 | 18/0.108/114 |
| | 5000 | 20/0.136/91 | 18/0.130/114 |
| | 20/000 | 20/0.241/91 | 19/0.219/119 |
| | 30/000 | 21/0.221/95 | 19/0.230/119 |
| x_5 | 2000 | 16/0.102/65 | 15/0.097/75 |
| | 5000 | 16/0.111/65 | 16/0.100/80 |
| | 20/000 | 17/0.146/69 | 17/0.144/85 |
| | 30/000 | 17/0.177/69 | 17/0.176/85 |

| | | | |
|-------|--------|-------------|-------------|
| x_6 | 2000 | 14/0.084/57 | 14/0.084/70 |
| | 5000 | 14/0.105/57 | 14/0.098/70 |
| | 20/000 | 15/0.142/61 | 15/0.196/75 |
| | 30/000 | 15/0.166/61 | 15/0.173/75 |

مسئله ۲. در این مسئله مولفه‌های بردار به صورت زیر تعریف می‌گردند [18].

$$f_i(x) = 2x_i - \sin x_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

نتایج عددی حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله دو در جدول زیر مشاهده می‌گردد.

جدول ۲. نتایج محاسباتی هر دو الگوریتم برای مسئله دو.

| Initial points | Dim | k/CPU /NF | |
|----------------|--------|------------------------|----------------|
| | | الگوریتم (۲-۴) (TTDFP) | الگوریتم (۱-۵) |
| x_1 | 2000 | 16/0.083/65 | 16/0.064/80 |
| | 5000 | 17/0.078/69 | 17/0.081/85 |
| | 20/000 | 18/0.121/73 | 17/0.0129/85 |
| | 30/000 | 18/0.128/73 | 18/0.135/90 |
| x_2 | 2000 | 16/0.088/65 | 16/0.103/80 |
| | 5000 | 17/0.110/69 | 17/0.115/85 |
| | 20/000 | 18/0.164/73 | 17/0.152/85 |
| | 30/000 | 18/0.161/73 | 18/0.197/90 |
| x_3 | 2000 | 18/0.065/73 | 16/0.062/80 |
| | 5000 | 19/0.090/77 | 16/0.096/80 |
| | 20/000 | 19/0.123/77 | 17/0.108/85 |
| | 30/000 | 20/0.154/81 | 17/0.131/85 |
| x_4 | 2000 | 18/0.100/73 | 16/0.094/80 |
| | 5000 | 19/0.116/77 | 16/0.110/80 |
| | 20/000 | 19/0.164/77 | 17/0.155/85 |
| | 30/000 | 20/0.182/81 | 17/0.163/85 |
| x_5 | 2000 | 16/0.095/65 | 16/0.069/80 |
| | 5000 | 16/0.102/65 | 16/0.108/80 |

| | | | |
|-------|--------|-------------|-------------|
| x_6 | 20/000 | 17/0.128/69 | 17/0.111/85 |
| | 30/000 | 17/0.145/69 | 17/0.148/85 |
| | 2000 | 14/0.087/57 | 14/0.080/70 |
| | 5000 | 14/0.107/57 | 14/0.104/70 |
| | 20/000 | 15/0.139/61 | 15/0.141/75 |
| | 30/000 | 15/0.143/61 | 15/0.166/75 |

مسئله ۳. در این مسئله مولفه‌های بردار به صورت زیر تعریف می‌گردند [18].

$$\begin{cases} f_1(x) = 2x_1 - x_2 + \exp x_1 - 1, \\ f_i(x) = -x_{i-1} + 2x_i - x_{i+1} + \exp x_i - 1, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \\ f_n(x) = 2x_n - x_{n-1} + \exp x_n - 1. \end{cases}$$

نتایج عددی حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله سه در جدول زیر مشاهده می‌گردد.

جدول ۳. نتایج محاسباتی هر دو الگوریتم برای مسئله سه.

| Initial points | Dim | k/CPU/NF | |
|----------------|--------|------------------------|----------------|
| | | الگوریتم (۲-۴) (TTDFP) | الگوریتم (۱-۵) |
| x_1 | 2000 | 38/0.239/174 | 28/0.0255/199 |
| | 5000 | 36/0.503/169 | 28/0.528/194 |
| | 20/000 | 40/2.088/184 | 35/2.067/238 |
| | 30/000 | 40/2.824/182 | 32/2.764/217 |
| x_2 | 2000 | 35/0.259/161 | 37/0.317/239 |
| | 5000 | 48/0.689/222 | 42/0.753/276 |
| | 20/000 | 48/2.476/225 | 52/2.940/339 |
| | 30/000 | 45/3.576/221 | 50/4.729/335 |
| x_3 | 2000 | 53/0.451/387 | 44/0.410/394 |
| | 5000 | 60/1.484/561 | 51/1.230/461 |
| | 20/000 | 82/11.988/1173 | 73/11.363/1252 |
| | 30/000 | 42/6.098/403 | 62/11.943/918 |
| x_4 | 2000 | 49/0.386/286 | 55/0.510/397 |
| | 5000 | 51/0.925/307 | 55/1.373/489 |
| | 20/000 | 54/3.649/353 | 69/6.295/704 |

| | | | |
|-------|--------|--------------|--------------|
| | 30/000 | 62/6.701/445 | 52/5.824/453 |
| x_5 | 2000 | 40/0.273/183 | 35/0.294/226 |
| | 5000 | 45/0.650/208 | 44/0.777/291 |
| | 20/000 | 42/2.115/198 | 40/2.540/271 |
| | 30/000 | 46/3.261/217 | 43/4.063/304 |
| x_6 | 2000 | 32/0.321/145 | 28/0.256/174 |
| | 5000 | 32/0.600/147 | 30/0.531/190 |
| | 20/000 | 32/1.565/144 | 34/1.934/215 |
| | 30/000 | 29/2.062/131 | 35/2.870/223 |

مسئله ۴. در این مسئله مولفه‌های بردار به صورت زیر تعریف می‌گردند [18].

$$f_i(x) = x_i - \sin x_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

نتایج عددی حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله چهار در جدول زیر مشاهده می‌گردد.

جدول ۴. نتایج محاسباتی هر دو الگوریتم برای مسئله چهار.

| Initial points | Dim | k/CPU /NF | |
|----------------|--------|------------------------|----------------|
| | | الگوریتم (۲-۴) (TTDFP) | الگوریتم (۱-۵) |
| x_1 | 2000 | 64/0.095/193 | 65/0.097/260 |
| | 5000 | 83/0.148/250 | 84/0.208/336 |
| | 20/000 | 125/0.397/376 | 126/0.337/504 |
| | 30/000 | 142/0.465/427 | 143/0.512/572 |
| x_2 | 2000 | 64/0.108/193 | 65/0.141/260 |
| | 5000 | 83/0.188/250 | 84/0.173/336 |
| | 20/000 | 125/0.375/376 | 126/0.442/504 |
| | 30/000 | 142/0.508/427 | 143/0.538/572 |
| x_3 | 2000 | 65/0.086/198 | 65/0.081/262 |
| | 5000 | 85/0.164/250 | 84/0.144/338 |
| | 20/000 | 127/0.240/384 | 127/0.347/510 |
| | 30/000 | 144/0.494/435 | 143/0.490/574 |
| x_4 | 2000 | 65/0.105/198 | 65/0.102/262 |

| | | | |
|-------|--------|---------------|-----------------|
| | 5000 | 85/0.189/258 | 84/0.216/338 |
| | 20/000 | 127/0.413/384 | 127/0.409/510 |
| | 30/000 | 144/0.516/435 | 143/0.541/574 |
| x_5 | 2000 | 72/0.108/217 | 140/0.150/560 |
| | 5000 | 95/0.208/286 | 328/0.403/1312 |
| | 20/000 | 138/0.387/412 | 772/1.600/3088 |
| | 30/000 | 152/0.534/457 | 1122/2.690/4488 |
| x_6 | 2000 | 55/0.109/166 | 55/0.095/220 |
| | 5000 | 74/0.162/223 | 74/0.141/296 |
| | 20/000 | 116/0.344/349 | 117/0.365/468 |
| | 30/000 | 133/0.480/400 | 134/0.493/536 |

مسئله ۵. در این مسئله مولفه‌های بردار به صورت زیر تعریف می‌گردند [14].

$$\begin{cases} f_1(x) = 2x_1 + \sin x_1 - 1, \\ f_i(x) = -2x_{i-1} + 2x_i + \sin x_i - 1, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \\ f_n(x) = 2x_n + \sin x_n - 1. \end{cases}$$

نتایج عددی حاصل از اجرای دو الگوریتم روی مسئله پنج در جدول زیر مشاهده می‌گردد.

جدول ۵. نتایج محاسباتی هر دو الگوریتم برای مسئله پنج.

| Initial points | Dim | k/ NF/CPU | |
|----------------|------|------------------------|-------------------|
| | | الگوریتم (۲-۴) (TTDFP) | الگوریتم (۱-۵) |
| x_1 | 500 | 1248/1.646/4999 | 1065/1.628/6235 |
| | 1000 | 2855/6.058/13003 | 2560/5.673/14929 |
| | 1500 | 5041/12.178/23764 | 4444/11.908/26126 |
| | 2000 | 5267/14.261/24765 | 5920/12.232/34798 |
| x_2 | 500 | 1634/2.489/7327 | 1421/2.137/8450 |
| | 1000 | 2836/4.922/12780 | 1748/3.933/10098 |
| | 1500 | 4184/12.239/19488 | 3823/11.318/22469 |
| | 2000 | 6246/14.534/29680 | 5139/12.853/30257 |
| x_3 | 500 | 1101/1.587/4594 | 1088/1.616/6310 |

| | | | |
|-------|------|-------------------|-------------------|
| | 1000 | 2921/5.979/13176 | 2642/6.687/15450 |
| | 1500 | 4109/11.952/19013 | 4797/10.527/28145 |
| | 2000 | 5609/19.554/26470 | 5523/19.143/32676 |
| x_4 | 500 | fail | fail |
| | 1000 | fail | fail |
| | 1500 | fail | fail |
| | 2000 | fail | fail |
| x_5 | 500 | 1039/1.286/4310 | 964/1.452/5583 |
| | 1000 | 2890/6.745/13175 | 2679/6.522/15720 |
| | 1500 | 4063/9.448/18752 | 3893/9.586/22771 |
| | 2000 | 5424/18.602/25471 | 5695/18.568/33724 |
| x_6 | 500 | 1136/1.470/4867 | 1434/1.994/5883 |
| | 1000 | 3009/6.314/13902 | 2620/5.059/15267 |
| | 1500 | 4757/14.192/22329 | 3761/9.301/22091 |
| | 2000 | 5413/14.806/25464 | 5880/17.884/34815 |

با یک بررسی و کاوش ساده در نتایج درج شده در جداول فوق بسادگی می توان ملاحظه کرد که در فرآیند حل مسائل آزمون مشخص شده الگوریتم ها نسبتاً مشابه رفتار می کنند.

منابع و مأخذ

- [1] M. Al-Baali, Descent property and global convergence of the Fletcher Reeves method with inexact line search, *IMA Journal of Numerical Analysis* 5(1), 121-124 (1985).
- [2] J. Barzilai, J.M. Borwein, Two-point step size gradient methods, *IMA Journal of Numerical Analysis* 8(1), 141-148 (1988).
- [3] E.M.L. Beale, A derivative of conjugate gradients, in F.A. Lootsma eds., *Numerical Methods for Nonlinear Optimization*, Academic Press, London. 39-43 (1972).
- [4] G. Birgin, Ernesto, J.M. Martinez, A spectral conjugate gradient method for unconstrained optimization, *Applied Mathematics and Optimization* 43(2), 117-128(2001).
- [5] Y.H. Dai, C.X. Kou, A nonlinear conjugate gradient algorithm with an optimal property and an improved Wolfe line search, *SIAM Journal of Optimization* 23(1), 296–320 (2013).
- [6] Y.H. Dai, L.Z. Liao, New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods, *Applied Mathematics and Optimization* 43(1), 87-101 (2001).
- [7] J.E Dennis Jr, R.B. Schnabel, *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*, SIAM. Philadelphia (1996).
- [8] R. Fletcher, *Practical method of optimization*, Second edition, John Wiley and Sons, New York (2000).
- [9] R. Fletcher, C. Reeves, Function minimization by conjugate gradients, *Computer Journal* 7(2), 149-154 (1964).
- [10] J.C. Gilbert, J. Nocedal, Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization, *SIAM Journal on Optimization* 2(1), 21-42 (1992).

- [11] M.R. Hestenes, E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *Journal of research of National Bureau of Standards* 49(6), 409-436 (1952).
- [12] D.H. Li, M. Fukushima, A modified BFGS method and its global convergence in nonconvex minimization, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 129(1-2), 15-35 (2001).
- [13] J.K. Liu, Two efficient Nonlinear conjugate gradient methods, *Mathematics Numerical Sin.* 35, 286–296 (2013).
- [14] J.K. Liu, S.J. Li, A three-term derivative-free projection method for nonlinear monotone system of equations, *Calcolo* 53(3), 427–450 (2016).
- [15] G.H. Liu, J.Y. Han and H. X. Yin, Global convergence of the Fletcher-Reeves algorithm with an inexact line search, *Journal Applied Mathematics Chinese University. (Ser. B)* 10(1), 75-82(1995).
- [16] D.G. Luenberger, Y. Yinyu, *Linear and nonlinear programming*, Third Edition Springer Optimization and its Applications, New York (2006).
- [17] J. Nocedal, S. Wright, *Numerical Optimization*, Second Edition, Springer (2006).
- [18] G. Peiting, H. Chuanjing, A derivative-free three-term projection algorithm involving spectral quotient for solving nonlinear monotone equations, *Optimization* 67(10), 1631-1648 (2018).
- [19] A. Perry, A modified conjugate gradient algorithm, *Operations Research* 26(6), 1073–1078 (1978).

- [20] E. Polak, G. Ribiere, Not sur la convergence des methods de directions conjuguees, *Revue Francaise d'Informatique et de Research Operationell* 16, 35-43 (1969).
- [21] B.T. Polyak, The conjugate gradient method in extreme problems, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics* 9, 94-112 (1969).
- [22] M.J.D. Powell, Restart procedures for the conjugate gradient method, *Mathematical Programing* 12(1), 241-154 (1977).
- [23] M.J.D. Powell, *Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method*, *Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics*, 122–141 (1984).
- [24] M.V. Solodov, B.F. Svaiter, A globally convergent inexact newton method for systems of monotone equations, in: *Reformulation: Nonsmooth, Piecewise Smooth, Semismooth and Smoothing Methods*, (M. Fukushima, L. Qi eds.). Kluwer Academic Publishers, 355-369 (1998).
- [25] W. Sun and Y.X. Yuan, *Optimization Theory and Methods*, Springer, New York (2010).
- [26] Q.R. Yan, X.Z. Peng, D.H. Li, A globally convergent derivative-free method for solving large-scale nonlinear monotone equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 234(3), 649-657 (2010).
- [27] L. Zhang, A new Liu-Storey type nonlinear conjugate gradient method for unconstrained optimization problems, *Jornal of Computational and Applied Mathematics* 225(1), 146-157 (2009).
- [28] L. Zhang, W. Zhou, *A nonlinear conjugate gradient method based on the MBFGS secant condition*, *Optimization Methods and Software* 21(5), 707–714 (2006).
- [29] L. Zhang, W.J. Zhou, *Spectral gradient projection method for solving nonlinear monotone equations*, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 196(2), 478-484 (2006).

[30] L. Zhang, W. Zhou, D. Li, A descent modified Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient method and its global convergence. *IMA Journal of Numerical Analysis* 26(4), 629–640 (2006).

[31] G. Zoutendijk, Nonlinear programming computational methods, in *Integer and Nonlinear Prigramming*, Jornal Abadie, ed. , North-Holland, Amsterdam, 37-86 (1970).

واژگان فارسی به انگلیسی

| | |
|---|-----------------------------------|
| <i>Memoryless</i> | بدون حافظه..... |
| <i>Symetrik rank two updates</i> | بهنگام‌های رتبه دو..... |
| <i>Nonlinrear optimization</i> | بهینه‌سازی غیر خطی..... |
| <i>Unconstrained Optimization</i> | بهینه‌سازی نامقید..... |
| <i>Uniformly convex funection</i> | تابع به‌طور یکنواخت محدب..... |
| <i>Quadratic function</i> | تابع مجذوری..... |
| <i>Convex function</i> | تابع محدب..... |
| <i>Line search</i> | جستجوی خطی..... |
| <i>Exact line search</i> | جستجوی خطی دقیق..... |
| <i>Direction Descent</i> | جهت کاهشی..... |
| <i>Memoryless BFGS method</i> | روش <i>BFGS</i> بدون حافظه..... |
| <i>Iterative methods</i> | روش‌های تکراری..... |
| <i>Projection method</i> | روش‌های تصویر..... |
| <i>Deravitive -free methods</i> | روش‌های بدون مشتق..... |
| <i>Steepest descent method</i> | روش تندترین کاهش..... |
| <i>Quasi-Newton method</i> | روش شبه‌نیوتن..... |
| <i>Conjugate gradient method</i> | روش گرادیان مزدوج..... |
| <i>Three-term Conjugate Gradient method</i> | روش گرادیان مزدوج سه‌جمله‌ای..... |
| <i>Spectral Conjugate Gradient method</i> | روش گرادیان مزدوج طیفی..... |
| <i>Newton method</i> | روش نیوتن..... |

| | |
|---|----------------------|
| <i>The sufficient descent condition</i> | شرایط کاهش کافی |
| <i>Hessian matrix</i> | ماتریس هسی |
| <i>Positive definit matrix</i> | ماتریس معین مثبت |
| <i>Nonlinear monotone equations</i> | معادلات غیرخطی یکنوا |
| <i>Global minimum</i> | مینیمم سراسری |
| <i>Local minimum</i> | مینیمم موضعی |
| <i>Order of convergence</i> | مرتبہ همگرایی |
| <i>Global convergence</i> | همگرایی سراسری |

Abstract

Solving of a nonlinear system of equations is one of the most important problems in applied mathematics. Some methods have been proposed to solve this problem. Among these methods Newton method, Quasi-Newton methods are very famous while many modified versions of those are introduced. In most of these methods, we need to calculate the Jacobi matrix in each iteration and solve the corresponding linear equation system while this is the most disadvantage of these methods specially for large scale problems. In special cases where the system of equations has an especial class and some additional properties, some special algorithms can be used. The monotone nonlinear equations are one of important classes. The purpose of this thesis is introducing two new families of derivative-free that is based on projection methods while use some three-term conjugate gradient directions. It is showed that these directions satisfy in the sufficient descent condition. The global convergence of the new methods are investigated on some mild conditions while the numerical experiments show these methods are efficient.

key words:

Nonlinear monotone system of equations, Projection methods, Derivative-free algorithms, Conjugate gradient methods, Global convergence.



Razi University

*Master of science
Department of Mathematics*

M.Sc.Thesis

*Title of the Thesis :
Derivative-free three-term projection algorithms for solving nonlinear
monotone equations*

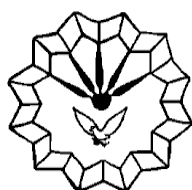
Evaluated and approved by thesis committee: as

Dr. K. Amini, Supervisor (Professor)

Dr. L. Pourkarimi, Examiner (Associate Professor)

Dr. A. Haghighi, Examiner (Assistant Professor)

December 2020



Razi University

*Master of science
Department of Mathematics*

M.Sc. Thesis

Title

*Derivative-free three-term projection algorithms for solving nonlinear
monotone equations*

Supervisor

Dr. Keyvan Amini

By

Farnaz MohammadSadeghi

December 2020

