مجله تحقیق در عملیات در کاربردهای آن، سال هجدهم، شماره چهارم (پیاپی ۷۱)،زمستان ۰۰، ص ص ۳۱-۲۱
شاپا ۷۲۸۶-۲۲۵۱

استفاده از یک روش جریمه‌ای کارا برای حل مساله کم‌ترین مربعات خطی با قیود غیرخطی

نرگس بیدآبادی[1*]
۱- استادیار، دانشگاه یزد، دانشکده علوم ریاضی، یزد، ایران

رسید مقاله: ۱۶ شهریور ۱۳۹۹
پذیرش مقاله: ۲۲ اردیبهشت ۱۴۰۰

چکیده

در این مقاله به استفاده یک روش جریمه‌ای برای حل مسایل کم‌ترین مربعات خطی با قیود غیرخطی می‌پردازیم. در هر تکرار از روش جریمه‌ای برای حل مساله، به محاسبه ماتریس هسی تصویرشده نیاز است. با توجه به این‌که تابع هدف مساله کم‌ترین مربعات خطی است، ماتریس هسی تصویرشده از تابع جریمه‌ای شامل دو قسمت است که مقدار دقیق یک قسمت از آن در دست است ولی محاسبه قسمت دیگر آن هزینه‌بر است. در این مقاله پس از به دست آوردن یک رابطه سکانت ساختمند از یک روش شبه نیوتن ساختمند برای تقریب ماتریس هسی تصویرشده استفاده نموده و سپس همگرایی سراسری و مجانبی روش ارایه شده را نشان می‌دهیم. نتایج عددی به دست آمده، کارایی این روش را نشان می‌دهند.

کلمات کلیدی: روش جریمه‌ای دقیق، مساله کم‌ترین مربعات، بهنگام‌سازی ساختمند.

۱ مقدمه

فرم کلی یک مساله کم‌ترین مربعات غیرخطی به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \min \quad & \tfrac{1}{2}\|F(x)\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x)=0, \quad i\in E=\{1,\dots,k\}, \\ & c_i(x)\ge 0, \quad i\in I=\{k+1,\dots,k+m\}, \end{aligned}$$

که در آن $x\in\mathbb{R}^n$، و توابع $F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^l$ و $c_i:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ ، $i=1,\dots,k+m$، توابعی دو بار مشتق‌پذیر پیوسته هستند. این دسته از مسایل، کاربرد بسیار وسیعی در علوم و مهندسی دارند [۱، ۲، ۳] و بنابراین حل عددی آنها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

الگوریتم‌های کارایی برای حل مسایل کم‌ترین مربعات ارایه شده‌اند. یک دسته از روش‌های کارا که برای حل مسایل بهینه‌سازی با ساختارهای ویژه ماتریس هسی تابع هدف، ارایه شده است، روش‌های شبه نیوتن

* عهده‌دار مکاتبات
آدرس الکترونیکی: n_bidabadi @yazd.ac.ir

ساختمند هستند [۴] که یک کاربرد خاص از این روش‌ها در حل مسایل کم‌ترین مربعات می‌باشد. اخیرا یک روش منظم‌سازی برای حل مسایل کم‌ترین مربعات با قیود تساوی مورد استفاده قرار گرفته است [۵]. همچنین در [۶] یک روش گوس-نیوتن برای حل مساله کم‌ترین مربعات نامقید وقتی که تابع هدف به صورت مجموع دو قسمت مشتق‌پذیر و مشتق‌ناپذیر باشد، ارایه شده است.

در این پژوهش، مساله کمترین مربعات خطی با قیود غیرخطی را به صورت زیر در نظر گرفته‌ایم:

$$\begin{aligned} \min \quad & \phi(x)=\tfrac{1}{2}\| Gx-b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x)=0, \quad i\in E=\{1,\dots,k\} \\ & c_i(x)\geq 0, \quad i\in I=\{k+1,\dots,k+m\}, \end{aligned} \tag{1}$$

که در آن، $G\in\mathbb{R}^{l,n}$، $b\in\mathbb{R}^{l}$.

توجه کنید که مساله حل دستگاه

$$\begin{cases} Gx=b, \\ c_i(x)=0, \quad i\in E=\{1,\dots,k\}, \end{cases}$$

که شامل معادلات خطی و غیرخطی است، را می‌توان به یک مساله بهینه‌سازی به صورت (۱) تبدیل نمود. بهبود روش‌های حل دستگاه معادلات خطی و غیرخطی نیز موضوع پژوهش‌های بسیاری بوده است که از آن جمله می‌توان به [۷] اشاره نمود.

در این پژوهش، برای بهنگام‌سازی ماتریس هسی تصویرشده در روش‌های جریمه‌ای دقیق در حل مسایل کم‌ترین مربعات خطی با قیود غیرخطی از روش‌های شبه نیوتن ساختمند بهره می‌گیریم. ابتدا یک رابطه سکانت ساختمند برای ماتریس هسی تصویرشده از تابع جریمه‌ای دقیق را برای این مساله به دست می‌آوریم و سپس از یک روش شبه نیوتن ساختمند برای تقریب این ماتریس در الگوریتم حل مساله استفاده می‌کنیم. سرانجام، نتایج عددی به دست آمده از پیاده‌سازی الگوریتم جریمه‌ای دقیق در محیط نرم‌افزاری MATLAB، در مقایسه با نتایج به دست آمده از تابع fmincon در نرم‌افزار MATLAB، کارایی روش ارایه‌شده را تایید می‌کند.

۲ الگوریتم جریمه‌ای دقیق

یک تابع جریمه‌ای دقیق برای حل مساله (۱) به صورت زیر است:

$$\psi(x,\mu)=\mu\phi(x)+\sum_{i=1}^{k}|c_i(x)|-\sum_{i=k+1}^{k+m}\min(0,c_i(x)). \tag{2}$$

که در آن μ پارامتر جریمه است. معلوم شده است که با مینیمم‌سازی (۲)، به ازای مقادیر مثبت و به اندازه‌ی کافی کوچک μ، جواب مساله (۱) به دست می‌آید. بنابراین به‌کارگیری این تابع، برای دست‌یابی به یک جواب مساله، مستلزم حل دنباله‌ای از مسایل جریمه‌ای به ازای مقادیر کاهشی μ است. باید توجه داشت که تابع مذکور در(۲)، در برخی نقاط مشتق‌ناپذیر است. به هر حال، هدف حل مساله جریمه‌ای دقیق، یعنی،

$$\min\ \psi(x,\mu) \tag{۳}$$

به ازای مقدارهای ثابت μ است. از آنجا که تابع $\psi(x,\mu)$ ناهموار است، نمی‌توان انتظار داشت که مساله نامقید (۳) با استفاده از روش‌های معمول بهینه‌سازی نامقید حل شود. در اینجا از روش ارایه‌شده توسط کولمن و کان [۸، ۹] استفاده می‌کنیم. در این روش، جهت‌های جستجو با استفاده از تابع زیر محاسبه می‌شوند:

$$\psi_\varepsilon(x,\mu)=\mu\phi(x)+\sum_{i\in VE(x,\varepsilon)}\operatorname{sgn}(c_i(x))c_i(x)-\sum_{i\in VI(x,\varepsilon)}c_i(x), \tag{۴}$$

که در آن:

$$\begin{aligned}VE(x,\varepsilon)&=\{i:\ |c_i(x)|>\varepsilon,\ \ ۱\le i\le k\},\\ VI(x,\varepsilon)&=\{i:\ c_i(x)<-\varepsilon,\ \ k+۱\le i\le k+m\}.\end{aligned} \tag{۵}$$

گرادیان و هسی تابع (۴) به صورت زیر هستند:

$$\begin{aligned}\nabla\psi_\varepsilon(x,\mu)&=\mu G^T(Gx-b)+\sum_{i\in VE(x,\varepsilon)}\operatorname{sgn}(c_i(x))\nabla c_i(x)-\sum_{i\in VI(x,\varepsilon)}\nabla c_i(x),\\ \nabla^۲\psi_\varepsilon(x,\mu)&=\mu G^TG+\sum_{i\in VE(x,\varepsilon)}\operatorname{sgn}(c_i(x))\nabla^۲c_i(x)-\sum_{i\in VI(x,\varepsilon)}\nabla^۲c_i(x).\end{aligned} \tag{۶}$$

در این الگوریتم، برای محاسبه جهت جستجو در برخی گام‌ها، از تجزیه‌ی QR برای ماتریس گرادیان‌های قیود ε-موثر، یعنی،

$$A(x_k)=[\ldots\nabla c_i(x_k)\ldots]_{i\in\{i=۱,\ldots,k+m\ :\ |c_i(x_k)|<\varepsilon\}} \tag{۷}$$

استفاده می‌شود. در این تجزیه داریم:

$$A(x_k)=Q\begin{bmatrix}R\\ ۰\end{bmatrix}=[Y(x_k)\quad Z(x_k)]\begin{bmatrix}R(x_k)\\ ۰\end{bmatrix}, \tag{۸}$$

که در آن، Q یک ماتریس متعامد نرمال، R یک ماتریس بالامثلثی و $Z(x_k)$ ماتریسی است که، $Z(x_k)^TZ(x_k)=I$ و $A(x_k)^TZ(x_k)=۰$.

برای تعیین مسیر حرکت در الگوریتم، تقریبی از ماتریس هسی تصویر شده $H_{z,k}=Z(x_k)^TH_kZ(x_k)$ به کار می‌رود که در آن،

$$H_k=\nabla^۲\psi_\varepsilon(x_k,\mu)-\sum_{i\in AC(x_k,\varepsilon)}\lambda_i^k\nabla^۲c_i(x_k), \tag{۹}$$

و

$$AC(x_k,\varepsilon)=\{i:\ |c_i(x_k)|\le\varepsilon,\ ۱\le i\le k+m\}, \tag{۱۰}$$

و λ_i^kها در نزدیکی جواب، تقریب ضرایب لاگرانژ و در بقیه جاها صفر هستند. یکی از جهت‌های جستجوی مورد استفاده در الگوریتم (h) با حل دستگاه زیر حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned}H_{z,k}w&=-Z(x_k)^T\nabla\psi_\varepsilon(x_k,\mu),\\ h&=Z(x_k)w\end{aligned} \tag{۱۱}$$

در ادامه، الگوریتم استفاده‌شده برای حل مساله را به طور مختصر بیان می‌کنیم (برای مشاهده جزییات [۱۰] را ببینید):

الگوریتم:

گام ۰ : پارامترهای $\tau>0$ و $\varepsilon>0$ و نقطه شروع x_0 داده شده‌اند. قرار دهید $k=0$.

گام ۱: ماتریس $Z(x_k)$ را به دست آورید و قرار دهید $global=1$ و $optimal=0$.

گام ۲: اگر $\|Z(x_k)^T\nabla\psi_\varepsilon(x_k,\mu)\|>\tau$، آنگاه تقریب ضرایب لاگرانژ (λ^k) را صفر در نظر بگیرید و جهت $d=h$ را با حل دستگاه (۱۰) به دست آورید و به گام ۵ بروید.

گام ۳: تقریب ضرایب لاگرانژ (λ^k) را با مینیمم‌سازی $\|A(x_k)\lambda-\nabla\psi_\varepsilon(x_k,\mu)\|_2$ به دست آورید. قرار دهید:

$$AC=\{i:\ |c_i(x_k)|\le\varepsilon,\ 1\le i\le k+m\},$$

اندیس $i\in E\cap AC$ که $\lambda_i^k\notin[-1,1]$ یا اندیس $i\in I\cap AC$ که $\lambda_i^k\notin[0,1]$ را انتخاب کنید. اگر چنین اندیسی وجود ندارد به گام ۴ بروید. در غیر این صورت جهت $d=h$ را با حل دستگاه $A(x_k)d=-\mathrm{sgn}(\lambda_i^k)e_i$ که در آن، e_i ستون iام ماتریس همانی است را به دست آورده و به گام ۵ بروید.

گام ٤: قرار دهید $global=0$ و جهت h_k را با حل دستگاه (۱۰) و جهت v_k را از حل دستگاه $A(x_k)^Tv=-c_{AC}(x_k+h_k)$ به دست آورید. قرار دهید $d=h_k+v_k$ و به گام ۶ بروید.

گام ۵: طول گام α_k را با استفاده از یک الگوریتم جستجوی خطی برای ψ_ε در جهت d به دست آورید.

گام ٦: اگر $x_k+\alpha_k d$ نسبت به x_k کاهش کافی در مقدار ψ ایجاد می‌کند، قرار دهید $x_{k+1}=x_k+\alpha_k d$، در غیر این صورت به گام ۸ بروید.

گام ۷: اگر $global=0$ آنگاه شرایط بهینگی را برای x_k بررسی کنید. اگر x_k بهینه است، آنگاه قرار دهید $optimal=1$ و توقف کنید، در غیر این صورت قرار دهید، $k=k+1$ و به گام ۱ بروید.

گام ۸: اگر $global=1$ آنگاه ε را کاهش دهید به طوری که مجموعه AC تغییر کند، در غیر این صورت τ را کاهش دهید تا $\|Z(x_k)^T\nabla\psi_\varepsilon(x_k,\mu)\|$ از τ بزرگ‌تر شود.

گام ۹: اگر $global=1$ و با تغییر ε به صفر نیز، نمی‌توان AC را تغییر داد یا این‌که ε خیلی کوچک یا τ خیلی کوچک است. لذا الگوریتم ناموفق بوده و توقف کنید. در غیر این صورت قرار دهید، $k=k+1$ و به گام۱ بروید.

با توجه به ساختار ویژه ماتریس H_k، می‌توان از روش‌های ساختمند برای بهنگام‌سازی ماتریس هسی تصویرشده $H_{z,k}$ در حل مساله کم‌ترین مربعات خطی مقید به قیود غیرخطی استفاده کرد. در بخش بعدی یک رابطه سکانت ساختمند برای محاسبه ماتریس هسی تصویر شده را به دست می‌آوریم.

۳ رابطه سکانت

برای مساله (۱) داریم:

$$H_k = \mu G^T G + \sum_{i\in VE(x_k,\varepsilon)} \mathrm{sgn}(c_i(x_k))\nabla^2 c_i(x_k) - \sum_{i\in VI(x_k,\varepsilon)} \nabla^2 c_i(x_k) - \sum_{i\in AC(x_k,\varepsilon)} \lambda_i^k \nabla^2 c_i(x_k), \qquad (۱۲)$$

و بنابراین

$$H_{z,k} = Z(x_k)^T H_k Z(x_k) = \mu Z(x_k)^T G^T G Z(x_k) + Z(x_k)^T T(x_k,\lambda^k) Z(x_k), \qquad (۱۳)$$

که در آن

$$\begin{aligned} T(x_k,\lambda^k) = Z(x_k)^T[&\sum_{i\in VE(x_k,\varepsilon)} \mathrm{sgn}(c_i(x_k))\nabla^2 c_i(x_k) - \\ &\sum_{i\in VI(x_k,\varepsilon)} \nabla^2 c_i(x_k) - \sum_{i\in AC(x_k,\varepsilon)} \lambda_i^k \nabla^2 c_i(x_k)]Z(x_k). \end{aligned} \qquad (۱۴)$$

بنابراین برای تقریب ماتریس هسی تصویرشده $H_{z,k}$ به وسیله ماتریس $B_{z,k}$ کافی است که تقریبی برای ماتریس $Z(x_k)^T T(x_k,\lambda^k) Z(x_k)$ به صورت $A_{z,k}$ به دست آوریم و قرار دهیم:

$$B_{z,k} = \mu Z(x_k)^T G^T G Z(x_k) + A_{z,k}.$$

پس به دنبال روشی برای به دست آوردن $A_{z,k}$ که تقریبی از ماتریس $Z(x_k)^T T(x_k,\lambda^k) Z(x_k)$ است، هستیم. در نزدیکی x^*، جواب مساله، می‌توان انتظار داشت که به ازای هر k داشته باشیم:

$$\begin{aligned} &AC(x_k,\varepsilon) = AC(x^*,0), \\ &VE(x_k,\varepsilon) = VE(x^*,0), \\ &VI(x_k,\varepsilon) = VI(x^*,0). \end{aligned}$$

فرض کنید $|AC(x^*,0)| = t$ و $A_{z,k} \approx Z(x_k)^T T(x_k,\lambda^k) Z(x_k)$. هدف، محاسبه $A_{z,k+1}$ است به طوری که $A_{z,k+1} \approx Z(x_{k+1})^T T(x_{k+1},\lambda^{k+1}) Z(x_{k+1})$.

با قرار $s_k = Z(x_{k+1})^T (x_{k+1} - x_k)$، داریم: $x_{k+1} - x_k = Y(x_{k+1})q_k + Z(x_{k+1})s_k$، که $Y(x_{k+1})$ یک ماتریس پایه برای برد $A(x_{k+1})$ است و $q_k = Y(x_{k+1})^T (x_{k+1} - x_k)$. توجه داریم که اگر قیود مساله نیز خطی باشند، آنگاه به ازای هر k، داریم $q_k = 0$. وقتی قیود غیرخطی هستند، در نزدیکی جواب می‌توان انتظار داشت که $Y(x_{k+1})q_k$ کوچک باشد [۱۰] و در نتیجه y_k را به عنوان تقریبی از $Z(x_{k+1})^T T(x_{k+1},\lambda^{k+1}) Z(x_{k+1}) s_k$ به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$Z(x_{k+1})^T T(x_{k+1},\lambda^{k+1}) Z(x_{k+1}) s_k \approx Z(x_{k+1})^T[(E_{k+1} - E_k)\sigma_{k+1} - (I_{k+1} - I_k)e + A_k\lambda^k] := y_k, \qquad (۱۵)$$

که در آن،

$$\begin{aligned} &e = [1\ldots 1]^T, \\ &A_k = [\ldots \nabla c_i(x_k) \ldots]_{i\in AC(x_k,\varepsilon)}, \\ &E_k = [\ldots \nabla c_i(x_k) \ldots]_{i\in VE(x_k,\varepsilon)}, \\ &I_k = [\ldots \nabla c_i(x_k) \ldots]_{i\in VI(x_k,\varepsilon)}, \\ &\sigma_k = [\ldots \mathrm{sgn}(c_i(x_k)) \ldots]^T_{i\in VE(x_k,\varepsilon)}. \end{aligned} \qquad (۱۶)$$

اکنون، $A_{z,k+1}$ را به گونه‌ای در نظر می‌گیریم که در رابطه سکانت (ساختمند) صدق کند، یعنی داشته باشیم:

$$A_{z,k+1} s_k = y_k. \tag{۱۷}$$

با توجه به این که فرض کوچک بودن $Y(x_{k+1})q_k$ ممکن است در همه نقاط درست نباشد ([۱۱] را ببینید)، تنها در صورتی از بهنگام‌سازی سکانت و رابطه سکانت (۱۷) برای محاسبه $A_{z,k+1}$ استفاده می‌کنیم که $Y(x_{k+1})q_k$ واقعاً کوچک باشد، یعنی وقتی داشته باشیم:

$$\|q_k\| < \frac{\eta}{(k+1)^{1+\nu}} \|s_k\|, \tag{۱۸}$$

به ازای $\nu = 0/01$.

۴ بهنگام‌سازی ساختمند ماتریس هسی تصویرشده

با توجه به مطالبی که در بخش قبلی بیان شد، ماتریس هسی تصویرشده را با استفاده از روش BFGS ساختمند به دست می‌آوریم که فرمول آن به صورت زیر است [۱۲]:

$$A_{z,k+1} = A_{z,k} + \frac{(y_k - A_{z,k}s_k)v_k^T + v_k(y_k - A_{z,k}s_k)^T}{v_k^T s_k} - \frac{(y_k - A_{z,k}s_k)^T s_k}{(v_k^T s_k)^2} v_k v_k^T, \tag{۱۹}$$

که در آن $v_k = y_k^s + \sqrt{\frac{s_k^T y_k^s}{s_k^T A_k^s s_k}} A_k^s s_k$ ، $y_k^s = y_k + \mu Z(x_{k+1})^T G^T G Z(x_{k+1}) s_k$ و

$$A_k^s = A_{z,k} + \mu Z(x_{k+1})^T G^T G Z(x_{k+1}).$$

می‌توان دید که $A_{z,k+1}$ به دست آمده از رابطه (۱۹)، در رابطه سکانت (۱۷) صدق می‌کند. در بخش بعدی به بیان نتایج همگرایی سراسری و موضعی الگوریتم، با به‌کارگیری فرمول BFGS ساختمند برای بهنگام‌سازی ساختمند ماتریس هسی تصویرشده می‌پردازیم.

۵ همگرایی

ابتدا تعاریف و فرض‌های مورد نیاز برای همگرایی سراسری را بیان می‌کنیم.

فرض‌های همگرایی سراسری:

- در الگوریتم جستجوی خطی، α_k طوری به دست می‌آید که

$$\psi(x_k,\mu) - \psi(x_k + \alpha_k d_k, \mu) \geq \gamma_1 (d_k^T g_k)^2$$

که در آن، $\gamma_1 > 0$ و

$$g^k = \nabla\psi(x_k,\mu) + \sum_{i \in VE(x_k,\varepsilon)} \operatorname{sgn}(c_i(x_k)) \nabla c_i(x_k) - \sum_{i \in VI(x_k,\varepsilon)} \nabla c_i(x_k)$$

و

$$VE(x_k,\varepsilon) = \{i \in E \cap AC(x_k,\varepsilon) : \left|\nabla^T c_i(x_k) d_k\right| > 0\},$$
$$VI(x_k,\varepsilon) = \{i \in I \cap AC(x_k,\varepsilon) : \nabla^T c_i(x_k) d_k < 0\}.$$

- دنباله نقاط x_k تولید شده از الگوریتم با یک نقطه شروع دلخواه x_0، به یک مجموعه فشرده D تعلق دارند.
- توابع c_i ، $i \in E \cup I$، روی D دوبار مشتق‌پذیر پیوسته هستند.
- x^* یک مینیمم‌کننده موضعی برای $\psi(x,\mu)$ در D است که شرایط مرتبه دوم اکید را برقرار می‌سازد.
- گرادیان‌های قیود موثر در x^* مستقل خطی‌اند.

اکنون، قضیه همگرایی سراسری الگوریتم را بیان می‌کنیم.

قضیه ۵-۱: فرض کنید که D یک مجموعه فشرده است و تعداد نقاط ایستای ψ در D متناهی است.

- همه‌ی نقاط مرتبه اول ψ در D، نقاط مرتبه دوم اکید برای ψ هستند.
- گرادیان‌های قیود ε- موثر در x_k مستقل خطی‌اند. به علاوه فرض کنید که برای هر زیردنباله x_{k_i} از x_k که $AC(x_{k_i},\varepsilon) = AC(x^*,0)$ و $x_{k_i} \to x^*$، ثابت مثبت به اندازه‌کافی کوچک δ وجود دارد به طوری که

$$\left\|(A_{z,k_i} - Z^T(x_{k_i})T(x_{k_i},\lambda_{k_i})Z(x_{k_i}))s_{k_i}\right\| \le \delta \left\|s_{k_i}\right\|.$$

در این صورت، x_k به x^* همگراست.

اثبات: مشابه اثبات قضیه۴-۳ در [۱۳] است.

در ادامه فرض‌های مورد نیاز برای همگرایی مجانبی الگوریتم بیان شده است.

فرض‌های همگرایی مجانبی:

- (A1): x^* یک جواب موضعی برای مساله است و $D = \{x: \ \|x - x^*\| \le \varepsilon_1\}$، که در آن، $\varepsilon_1 > 0$.
- (A2): دنباله نقاط x_k از الگوریتم، با یک نقطه شروع دلخواه x_0، تولید می‌شود.
- (A3): توابع c_i ، $i \in E \cup I$، روی D دو بار مشتق‌پذیر پیوسته‌اند.
- (A4): توابع $\nabla^2 c_i(x)$ ، $i \in E \cup I$ در x^* پیوسته لیپشیتز هستند، یعنی به ازای هر $i \in E \cup I$، ثابت $L_i > 0$ و عدد $p_i \in (0,1)$ وجود دارند به طوری که برای هر $x \in D$، داریم:

$$\|\nabla^2 c_i(x) - \nabla^2 c_i(x^*)\| \le L_i \|x - x^*\|^{p_i}$$

به‌علاوه $\lambda(x) = \arg\min \|A(x)\lambda - \nabla \psi_\varepsilon(x,\mu)\|_2$ در x^* پیوسته لیپشیتز است.

- (A5): $P(x) = \mu Z(x)^T G^T G Z(x)$ در x^* پیوسته لیپشیتز است، یعنی ثابت $L > 0$ و عدد $p \in (0,1)$ وجود دارند به طوری که برای هر $x \in D$، داریم:

$$\|P(x) - P(x^*)\| \le L \|x - x^*\|^p .$$

- (A6): گرادیان‌های قیود موثر در x_k، برای هر k، مستقل خطی‌اند.
- (A7): ثابت‌های مثبت b_1 و b_2 وجود دارند به طوری که برای هر $w \neq 0$ با بعد مناسب، داریم:

$$b_1 \|w\|^2 \le w^T B^* w \le b_2 \|w\|^2,$$

که در آن، B^* ماتریس هسی تصویرشده در x^* است.

اکنون به بیان قضایای همگرایی مجانبی الگوریتم می‌پردازیم.

قضیه ۵-۲: فرض کنید نامساوی (۱۸) و فرض‌های (A4) تا (A7) برقرارند. در این صورت $\varepsilon_2 > 0$ وجود دارد که اگر $\| x_k - x^* \| \le \varepsilon_2$ و $\| x_{k+1} - x^* \| \le \varepsilon_2$، آنگاه ثابت $C_1 \ge 1$ وجود دارد که

$$\| y_k - A_z^* s_k \| \le \gamma_k \| s_k \|,$$

که در آن

$$\omega_k \le \gamma_k \le C_1 (1+\eta)\omega_k + \eta \tfrac{\|Z^* B^* Y^*\|}{(1+k)^{1+\nu}}, \qquad (20)$$

و $\omega_k = \max(\| x_k - x^* \|, \| x_{k+1} - x^* \|)$ و $A_z^* = Z(x^*)^T T(x^*, \lambda^*) Z(x^*)$.

اثبات: برای سادگی نمایش علامت خط روی یک متغیر، نشان‌دهنده این است که مقدار آن در نقطه x_{k+1} محاسبه می‌شود و عدم نمایش علامت خط روی متغیر نشان‌دهنده این است که مقدار آن در نقطه x_k محاسبه می‌شود. با استفاده از فرض (A4) و قضیه تیلور داریم:

$$\begin{aligned}
&(\bar{E} - E)\bar{\sigma} = \sum_{i \in VE(\bar{x},0)} \mathrm{sgn}(c_i(\bar{x}))\nabla^2 c_i(\bar{x})(\bar{x} - x) + U_1(\bar{x} - x),\\
&(\bar{I} - I)e = \sum_{i \in VI(\bar{x},0)} \nabla^2 c_i(\bar{x})(\bar{x} - x) + U_2(\bar{x} - x),\\
&(\bar{A} - A)\bar{\lambda} = \sum_{i \in AC(\bar{x},0)} \bar{\lambda}_i \nabla^2 c_i(x_k)(\bar{x} - x) + U_3(\bar{x} - x),\\
&(\bar{A} - A)(\bar{\lambda} - \lambda) = U_4(\bar{x} - x),
\end{aligned}$$

که $\| U_i \| = O\| \bar{x} - x \|$ برای $i = 1,\dots,4$. از این‌که $\bar{Z}^T \bar{A} = 0$ و از تعریف y داریم:

$$\begin{aligned}
y &= \bar{Z}^T[(\bar{E} - E)\bar{\sigma} - (\bar{I} - I)e + A\lambda]\\
&= \bar{Z}^T[(\bar{E} - E)\bar{\sigma} - (\bar{I} - I)e + A\bar{\lambda} + (\bar{A} - A)(\bar{\lambda} - \lambda)]\\
&= \bar{Z}^T T(\bar{x}, \bar{\lambda})(\bar{x} - x) + \bar{Z}^T U(\bar{x} - x),
\end{aligned}$$

که $\| U \| = O\| \bar{x} - x \|$. از آنجایی که $\bar{x} - x = \bar{Y}q + \bar{Z}s$ نتیجه می‌گیریم:

$$y = \bar{Z}^T T(\bar{x}, \bar{\lambda})(\bar{Y}q + \bar{Z}s) + \bar{Z}^T U(\bar{Y}q + \bar{Z}s),$$

که نتیجه می‌دهد که:

$$y - A_z^* s = (\bar{Z}^T T(\bar{x}, \bar{\lambda})\bar{Z} - A_z^* + \bar{Z}^T U \bar{Z})s + (\bar{Z}^T T(\bar{x}, \bar{\lambda})\bar{Y} + \bar{Z} U \bar{Y})q.$$

ادامه اثبات، مشابه اثبات لم ۴-۱۳ در [۱۴] است.

قضیه ۵-۳: فرض کنید نامساوی (۱۸) و فرض‌های (A4) تا (A7) برقرارند و $A_{z,k+1}$ با استفاده از رابطه (۱۹) محاسبه می‌شود. در این صورت ثابت مثبت α_1 و مجموعه $\bar{D} \subseteq D$ وجود دارند به طوری که

$$\| A_{z,k+1} - A_z^* \|_{B^*} \le \| A_{z,k} - A_z^* \|_{B^*} + \alpha_1 \gamma_k, \qquad (21)$$

برای هر $x_k, x_{k+1} \in \bar{D}$ که $\| . \|_{B^*} = \| B^{*-\frac{1}{2}} (.) B^{*-\frac{1}{2}} \|_F$.

اثبات: مشابه اثبات قضیه ۶-۴ در [۱۵] است.

قضیه ۵-٤: فرض کنید که فرض‌های (A1) تا (A7) برقرارند و $K>0$ موجود است به طوری که برای $k>K$ نامساوی (۱۸) برقرار می‌شود و برای $k>K$، $B_{z,k}$ها در الگوریتم با استفاده از فرمول BFGS ساختمند به دست می‌آیند. در این صورت داریم:

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\|(A_{z,k}-A_z^*)s_k\|}{\|x_{k+1}-x_k\|}=0. \tag{۲۲}$$

اثبات: مشابه اثبات قضیه ۷-۴ در [۱۵] است.

قضیه ۵-۵: فرض کنید که فرض‌های (A1) تا (A7) برقرارند، دنباله $\{x_k\}$ با الگوریتم تولید می‌شود، به این صورت که وقتی نامساوی (۱۸) برقرار است، $B_{z,k}$ از فرمول BFGS ساختمند به دست می‌آید و در غیر این صورت، $B_{z,k}=B_{z,k-1}$. در این صورت، ثابت‌های مثبت ε و δ وجود دارند به‌طوری که اگر $\|x_0-x^*\|\le\varepsilon$ و $\|A_{z,0}-A_z^*\|_W\le\delta$، آنگاه دنباله $\{x_k\}$ با نرخ زبرخطی دوگامی به طور مجانبی به x^* همگراست، یعنی

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

اثبات: با استفاده از روابط (۲۱) و (۲۲)، حکم از قضیه ۴-۴ در [۱۵] به دست می‌آید.

٦ نتایج عددی

الگوریتم را برای حل مساله بهینه‌سازی به صورت (۱) آزمون کردیم، که در آنها $G\in\mathbb{R}^{l\times n}$ و $b\in\mathbb{R}^l$ ماتریس و بردار تصادفی در [۵, ۵-] هستند که با استفاده از دستور rand در نرم افزار MATLAB تولید شده‌اند. همچنین، معادلات غیرخطی به صورت زیر هستند:

$$c_i(x)=(3-2x_{i+1})x_{i+1}-x_i-2x_{i+2}+1=0,\quad i=1,\dots,n-2,$$

که در [۱۶] آمده‌اند. برای مقایسه الگوریتم با روش‌های دیگر، نتایج به‌دست آمده از اجرای تابع fmincon در MATLAB برای این ۱۶ مساله تصادفی را به دست آوردیم. نقطه شروع هر دو الگوریتم بردار صفر در نظر گرفته شده است. نتایج حاصل از اجرای دو الگوریتم در جدول ۱ آمده است. در این جدول l و n نشان‌دهنده ابعاد مساله هستند.

با توجه به جدول ۱ واضح است که روش ارایه‌شده برای رسیدن به یک جواب با دقت مناسب به تعداد ارزیابی بسیار کمتری از توابع قیود مساله نیاز دارد که این امر کارایی روش پیشنهادی را نشان می‌دهد.

جدول ۱. نتایج عددی حاصل از اجرای الگوریتم‌ها بر روی مسایل آزمون

تعداد ارزیابی توابع قیود		مقدار نهایی تابع هدف		خطای شدنی بودن جواب		ابعاد مساله	
الگوریتم ارایه‌شده	fmincon	الگوریتم ارایه‌شده	fmincon	الگوریتم ارایه‌شده	fmincon	n	l
۲۴	۱۶۵۶	۱/۷۵E+۰۱	۱/۷۵E+۰۱	۱/۸۷E-۰۳	۲/۸۸E-۱۰	۵	۳
۳۷	۳۳	۲/۱۱۰۱۲۷	۲/۱۰۸۵۶۲	۱/۶۸E-۱۰	۲/۲۶E-۰۷	۵	۳
۲۵	۲۰۳	۰/۱۵۴۴۸۴	۰/۱۵۴۴۸۴	۱/۹۲E-۰۸	۳/۱۱E-۰۹	۵	۳

۴۲	۱۰۸۲	۴۸/۹۶۵۵۴	۵۰/۲۲۵۲۱	۱/۶۴E-۰۹	۸/۴۳E-۰۸	۱۰	۸
۳۴	۲۶۰۲	۱/۱۴E+۰۲	۱/۰۹E+۰۲	۰/۰۱۰۹۰۸	۷/۳۱E-۰۸	۱۰	۸
۲۵	۳۴۱۷	۵۸/۴۸۷۰۵	۵۸/۴۵۵۷	۶/۵۱E-۰۵	۲/۲۹E-۰۸	۱۰	۸
۳۰	۲۱۳۹	۵/۵۲E+۰۲	۶/۱۷E+۰۲	۰/۰۰۸۸۰۶	۸/۴۶E+۰۰	۲۰	۱۸
۵۷۸	۱۲۴۹	۶/۱۷E+۰۲	۷/۶۲E+۰۲	۸/۳۷E-۰۹	۸/۸۴E-۱۱	۲۰	۱۸
۴۹	۲۲۰۹	۴/۳۷E+۰۲	۴/۳۷E+۰۲	۹/۷۵E-۰۴	۱/۵۰E-۰۹	۲۰	۱۸
۵۷	۲۶۷۸	۱/۵۳E+۰۳	۱/۳۹E+۰۳	۴/۱۱E-۱۲	۶/۵۶E-۱۱	۳۰	۲۸
۳۶	۱۲۵۵	۱/۳۰E+۰۳	۹/۹۲E+۰۲	۴/۲۱E-۱۵	۷/۹۳E-۱۱	۳۰	۲۸
۳۰	۳۳۸۶	۹/۹۷E+۰۲	۱/۱۱E+۰۳	۴/۹۷E-۱۳	۱/۳۶E-۱۲	۳۰	۲۸
۴۴	۵۲۱	۲/۲۲E+۰۳	۲/۶۲E+۰۳	۱/۷۳E-۰۸	۲/۰۸E-۱۴	۴۰	۳۸
۶۰	۳۰۵	۱/۹۴E+۰۳	۱/۵۲E+۰۳	۳/۴۷E-۱۲	۶/۶۸E-۱۳	۴۰	۳۸
۲۳۲	۳۴۸۹	۴/۹۲۲۴E+۰۳	۴/۴۸E+۰۳	۱/۹۱E-۱۲	۱/۹۰E-۱۴	۵۰	۴۸
۴۳	۱۶۴۲	۵/۰۷E+۰۳	۴/۸۴E+۰۳	۴/۷۳E-۱۱	۱/۵۰E-۱۱	۵۰	۴۸

۷ نتیجه‌گیری

در این مقاله به ارایه یک روش جریمه‌ای دقیق برای حل مسایل کم‌ترین مربعات خطی با قیود غیرخطی پرداختیم. با توجه به ساختار خاص تابع هدف مساله، ابتدا یک رابطه سکانت ساختمند برای ماتریس هسی تصویرشده در مساله جریمه‌ای به دست آوردیم. سپس از یک روش شبه نیوتن ساختمند برای تقریب ماتریس هسی تصویرشده استفاده نموده و قضایای همگرایی سراسری و مجانبی روش ارایه‌شده را بیان نمودیم. کارایی روش ارایه‌شده را نیز با نتایج عددی به دست آمده از الگوریتم و نتایج حاصل از اجرای تابع fmincon در MATLAB، مقایسه نمودیم.

منابع

[1] Nievergelt, Y., (2000). A tutorial history of least squares with applications to astronomy and geodesy. Journal of Computational and Applied Mathematics, 121, 37-72.

[2] Vandecappelle, M., Vervliet, N., Lathauwer, L. D., (2020). A Second-Order Method for Fitting the Canonical Polyadic Decomposition With Non-Least-Squares Cost. IEEE Transactions on Signal Processing, 68, 4454-4465.

[3] Wei, B., Xie, N., (2021). Parameter estimation for grey system models: A nonlinear least squares perspective. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 95, 105653.

[4] Dennis, J. E., Martinez, H. J., Tapia R. A., (1989). Convergence theory for the structured BFGS secant method with an application to nonlinear least squares. Journal of Optimization Theory and Applications, 61, 161-178.

[5] Orban, D., Siqueira, A.S., (2020). A regularization method for constrained nonlinear least squares. Computional Optimization and Applications, 76, 961–989.

[6] Shakhno, S.M., (2020). Gauss–Newton–Kurchatov Method for the Solution of Nonlinear Least-Squares Problems. Journal of Mathematical Sciences, 247, 58–72.

[7] Arzani, F., Peyghami, M. R., (2016). A Filtered Nonmonotone Approach for Solving Nonlinear Systems of Equations. Journal of Operational Research and Its Applications, 13(2), 85-99.

[8] Coleman, T. F., Conn, A. R., (1982). Nonlinear programming via an exact penalty function: Asymptotic analysis. Mathematical Programming, 24, 123–136.
[9] Coleman, T. F., Conn, A. R., (1982). Nonlinear programming via an exact penalty function: Global analysis. Mathematical Programming, 24, 137–161.
[10] Mahdavi-Amiri, N., Bartels, R. H., (1989). Constrained nonlinear least squares: An exact penalty approach with projected structured quasi-Newton updates. ACM Transactions on Mathematical Software, 15(3), 220–242**.**
[11] Nocedal, J., Overton, M. L., (1985). Projected Hessian updating algorithms for nonlinearly constrained optimization. SIAM J. Numerical Analysis, 22(5), 821–850.
[12] Bidabadi, N., Mahdavi-Amiri, N., (2012). A two-step superlinearly convergent projected structured BFGS method for constrained nonlinear least squares. Optimization, 62(6) (2013), 797-815.
[13] Mahdavi-Amiri, N., Ansari, M. R., (2013). Superlinearly convergent exact penalty projected structured Hessian updating schemes for constrained nonlinear least squares: global analysis, Optimization, 62(6), 675-691.
[14] Mahdavi-Amiri, N., Ansari, M. R., (2012). Superlinearly convergent exact penalty projected structured Hessian updating schemes for constrained nonlinear least squares: asymptotic analysis. Bulletin of the Iranian Mathematical Society, 38(3), 767-786.
[15] Bidabadi, N., Mahdavi-Amiri, N., (2014). Superlinearly Convergent Exact Penalty Methods with Projected Structured Secant Updates for Constrained Nonlinear Least Squares, Journal of Optimization Theory and Applications, 62(1), 154-190.
[16] Karmitsa, N., (2007). Test problems for large-scale nonsmooth minimization. Reports of the Department of Mathematical Information Technology. Series B, Scientific computing 4, University of Jyvaskyl.