

روش به روزرسانی متقارن از مرتبه-اول برای حل مسایل بهینه سازی مقیاس بزرگ

فرزین مدرس خیابانی^{۱*}، بهروز دانشیان^۲

۱- استادیار گروه ریاضی، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران

۲- دانشیار گروه ریاضی، واحد تهران مرکز، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

رسید مقاله: ۱ دی ۱۳۹۵

پذیرش مقاله: ۹ مرداد ۱۳۹۶

چکیده

جستجو جهت یافتن کمینه موضعی در مسایل بهینه سازی نامقید و یک نقطه ثابت از دستگاه گرادیان معادلات دیفرانسیل معمولی دو مساله نزدیک به هم می باشند، الگوریتم های با حافظه محدود به طور گسترده ای جهت حل مسایل مقیاس بزرگ استفاده می شوند؛ در حالی که روش های رانگ کوتا نیز برای حل عددی معادلات دیفرانسیل مورد استفاده قرار می گیرند. در این تحقیق با استفاده از ایده روش زیر فضا و طول گام ثابت و ادغام تکنیک های جستجوی خطی و ناحیه مطمئن، یک روش پیوندی مبتنی بر ODE برای حل مسایل بهینه سازی مقیاس بزرگ ارایه شده است. با توجه به اینکه روش های جستجوی خطی ممکن است نیازمند تکرارهای بیش تری برای همگرایی باشند؛ در حالی که روش های ناحیه مطمئن نیز نیازمند تکرارهای زیادی برای حل زیر مساله مقید باشند، کلاس جدیدی از روش ها طوری پیشنهاد شده، که بتواند بهترین ویژگی های روش های ناحیه مطمئن و جستجوی خطی را با هم ترکیب کند، ویژگی اصلی روش پیشنهادی این است که دستگاه معادلات خطی فقط یک بار جهت به دست آوردن گام آزمایشی حل می شود. علاوه بر این، در صورتی که گام آزمایشی مورد قبول قرار نگیرد این روش از جستجوی خطی بهره می جوید. نتایج یک سری از آزمون ها بر روی مسایل بهینه سازی نامقید استاندارد گزارش شده است. این نتایج عددی نشان دهنده مؤثر بودن الگوریتم جدید برای حل مسایل مقیاس بزرگ می باشد.

واژگان کلیدی: بهینه سازی نامقید، معادلات دیفرانسیل معمولی، روش های با حافظه محدود، جستجوی-خطی، ناحیه مطمئن

۱ مقدمه

در این مقاله، مسایل بهینه سازی نامقید به شکل کلی:

$$\min_{x \in R^n} f(x), \quad (1)$$

* عهده دار مکاتبات

آدرس الکترونیکی: f.modarres@iaut.ac.ir

در نظر گرفته می‌شود به طوری که $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ یک تابع به‌طور پیوسته مشتق پذیر، $\nabla f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ گرادیان f و $\nabla^2 f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ ماتریس هسیان f می‌باشند. در سراسر این مقاله، $\|\cdot\|$ نرم اقلیدسی روی $\mathbb{R}^n$ را نشان می‌دهد.

الگوریتم‌های بهینه‌سازی با شروع از نقطه داده شده x دنباله‌ای از تکرارهای $\{x_k\}$ را تولید می‌کنند. این دنباله تولید شده زمانی متوقف می‌شود که یا هیچ بهبود در جواب مشاهده نشود و یا اینکه جواب تقریبی با دقت کافی به دست آید. در نحوه تصمیم‌گیری برای حرکت از تکرار x_k به تکرار بعدی، الگوریتم‌ها از اطلاعات f در x_k (و احتمالاً از اطلاعات تکرارهای قبلی $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}$) استفاده می‌کنند. الگوریتم‌ها این اطلاعات را برای یافتن تکرار جدید x_{k+1} که مقدار کم‌تری در مقایسه با x_k دارد، مورد استفاده قرار می‌دهند.

الگوریتم ناحیه مطمئن^۱ و الگوریتم جستجوی خطی^۲ دو گروه عمده از الگوریتم‌ها می‌باشند که برای حرکت از نقطه فعلی x_k به نقطه جدید x_{k+1} ، مورد استفاده قرار می‌گیرند. روش‌های ناحیه مطمئن بر مبنای جستجویی هستند که یک تکرار جدید را در داخل یک ناحیه چند بُعدی محاط به نقطه فعلی تولید می‌کنند. تکرارهایی که توسط الگوریتم ناحیه مطمئن تولید می‌شوند در اغلب آن‌ها f به سرعت کاهش می‌یابد. روش‌های جستجوی خطی، هر تکرار را با جستجویی برای یک مقدار قابل قبول از x در راستای خطی که از تکرار قبلی می‌گذرد تکرار جدید تولید می‌کند. روش‌های ناحیه مطمئن به عنوان روش‌هایی با گام محدود نیز معروفند. این روش اولین بار برای حل مسایل غیر خطی کم‌ترین مربعات پیشنهاد گردید. در هر تکرار از روش‌های ناحیه مطمئن، به حل زیر مسأله نیاز داریم.

هر دو استراتژی فوق تکرار جدیدی را با کمینه کردن یک مدل درجه دوم از تابع f تعریف می‌کنند. روش‌های ناحیه مطمئن و جستجوی خطی امکان دارد با مشکل مواجه شود نزدیک نقاطی که ماتریس مدل منفرد باشد. در چنین حالت‌هایی، روش‌های جستجوی خطی ممکن است نیازمند تکرارهای زیادی جهت همگرایی باشد از طرفی روش‌های ناحیه مطمئن نیز نیازمند تکرارهای زیادی جهت حل زیر مسأله باشند. برای این منظور کلاس جدیدی از روش‌ها که بهترین ویژگی‌های روش‌های جستجوی خطی و ناحیه مطمئن را استفاده می‌کند، لحاظ شده است. روش‌های جستجوی-مطمئن همگرایی سریع‌تری در مقایسه با روش‌های ناحیه مطمئن به دست می‌دهند، و زیر مسأله را با هزینه کم‌تری نسبت به روش جستجوی خطی حل می‌کنند. این روش‌ها برای حل مسایل بهینه‌سازی مقیاس بزرگ و دستگاه معادلات غیرخطی مناسب می‌باشند.

در طول سال‌های اخیر روش‌های مبتنی بر معادلات دیفرانسیل معمولی برای حل مسایل بهینه‌سازی غیرخطی توجه محققان زیادی را جلب نموده است (مراجعه شود به [۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷]). براون و همکاران^۳ [۵] نشان دادند که وقتی روش‌های ODE در مسایل بهینه‌سازی نامقید به‌طور مناسب اجرا شود می‌توان مقایسه بسیار مطلوبی را بین

¹ Trust- region

² Line-search

³ Brown et al.

⁴ Narrow curved valley

الگوریتم‌های نیوتن و شبه نیوتن از لحاظ قابلیت اطمینان، دقت و کارایی به ویژه برای مسایل مینیمم‌سازی غیرخطی در قسمت‌های باریک منحنی^۱ انجام داد.

از بین تمامی روش‌های مبتنی بر ODE موفق‌ترین الگوریتم، الگوریتم IMPBOT می‌باشد [۶۸]. این روش برای مسایل در مقیاس کوچک قابل استفاده است؛ اما اگر تعداد متغیرها زیاد باشد حل دوباره دستگاه معادلات خطی می‌تواند به‌طور قابل ملاحظه‌ای هزینه محاسبات را افزایش دهد بنابراین هدف اصلی در طراحی مدل‌های مبتنی بر ODE^۲، ساده‌سازی دستگاه معادلات خطی و اجتناب از حل دوباره آن در یک تکرار می‌باشد. در سال‌های اخیر روش‌های پیوندی در این راستا ارایه شده‌اند که روش‌های ناحیه مطمئن را با روش‌های جستجوی خطی ادغام می‌کنند [۸،۹]. یکی از مزایای روش‌های جدید این است که وقتی گام آزمایشی مورد قبول واقع نشد یک جستجوی خطی جهت یافتن یک نقطه تکرار به جای حل دوباره زیرمسئله ناحیه مطمئن انجام می‌شود؛ بنابراین این روش‌ها نیاز به محاسبات کم‌تری نسبت به روش‌های ناحیه مطمئن کلاسیک دارند. با این حال روشن است که وقتی f درجه دو یا به مقدار زیاد غیرخطی باشد پیدا کردن طول گام مناسب در جهت جستجو دشوار می‌باشد و لذا گام به دست آمده ممکن است خیلی کوچک باشد (برای مثال وقتی که نقطه فعلی در قسمت‌های باریک منحنی قرار بگیرد). برای غلبه بر این مشکل، روش طول گام ثابت معرفی شده است (مراجعه شود به [۱۰،۱۱،۱۲،۱۳]).

لازم به ذکر است که روش‌های ناحیه مطمئن زیرفضا برای مسایل بهینه‌سازی نامقید معرفی شده‌اند [۱۴،۱۵]، به طوری که در هر تکرار زیرمسئله ناحیه مطمئن در یک زیر فضای ساده حل می‌شود؛ بنابراین در کل، کار محاسباتی در فضای حافظه مورد نیاز به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد [۱۶]. مشکلی که در این کلاس از روش‌ها وجود دارد این است که زیر فضا را باید با کدام گام آزمایشی یا ناحیه مطمئن متعلق به آن انتخاب کرد. مفروضات بالا موجب می‌شود که یک روش پیوندی جدید مبتنی بر ODE برای بهینه‌سازی نامقید ارایه شود به طوری که در آن ایده الگوریتم IMPBOT با روش زیرفضا و طول گام ثابت ادغام می‌شود. اروی و مارسیا^۳ [۱۷] مساله حل دستگاه معادلات خطی را با مؤلفه‌های حافظه محدود در نظر گرفته و رویکرد جدیدی را بر مبنای اجرای عملی از نمایش فشرده برای معکوس این ماتریس‌های حافظه محدود را ارایه دادند. نتایج عددی نشان داد که روش پیشنهادی در سرعت و دقت با سایر الگوریتم‌ها به‌خصوص اعضای خانواده برویدن قابل رقابت هست. برخلاف روش‌های موجود در منابع [۳،۵،۷،۱۸،۱۹،۲۰]، دستگاه معادلات خطی با بعد کم را فقط یک بار حل می‌کند؛ بنابراین کار محاسباتی کاهش می‌یابد. مزیت دیگری که دارد این است که وقتی گام آزمایشی مورد قبول واقع نشد، روش مذکور دستگاه معادلات خطی را دوباره حل نمی‌کند؛ بلکه یک نقطه تکرار ایجاد می‌کند که طول گام آن توسط فرمولی محاسبه شود؛ بنابراین از انجام یک جستجوی خطی برای محاسبه طول گام اجتناب می‌شود. به علاوه لازم نیست که تقریب ماتریس هسیان $f(x)$ معین مثبت یا نیمه‌معین مثبت باشد.

^۲ Ordinary differential equations

^۳ Erway and Marcia

کارایی روش ارایه شده در محاسبات عملی و نیز آزمون‌های عددی انجام یافته، شرح داده شده است. بر این اساس می‌توان گفت ایده اصلی این مقاله استفاده از روش جستجوی مطمئن برای حل مسایل بهینه‌سازی مقیاس بزرگ مبتنی بر ODE می‌باشد.

ساختار این مقاله به صورت زیر می‌باشد: در قسمت ۲، ابتدا استراتژی ناحیه مطمئن را بررسی کرده و سپس نحوه ادغام روش‌های ناحیه مطمئن با روش‌های جستجوی خطی مورد بحث قرار می‌گیرد. قسمت سوم، جستجوی-مطمئن پیشنهادی را ارایه می‌کند برای این منظور ابتدا نمایش فشرده‌ای از الگوریتم به روزرسانی متقارن از رتبه‌ی یک را خواهیم داشت و سپس الگوریتم پیشنهادی ارایه خواهد شد. در نهایت نتایج عددی به دست آمده از اجرای الگوریتم پیشنهادی بر روی مجموعه توابع آزمون استاندارد در قسمت ۴ ذکر می‌شود.

۲ روش ناحیه مطمئن

روش ناحیه مطمئن برای حل مسأله (۱) یک گام آزمایشی را با حل زیر مسأله :

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} g_k^T d + \frac{1}{2} d^T B_k d &\equiv \phi_k(d) \\ \text{s.t. } \|d\| &\leq \Delta_k, \end{aligned} \quad (2)$$

محاسبه می‌کند که $g_k = \nabla f(x_k)$ گرادیان تابع هدف در جواب تقریبی فعلی است و B_k یک ماتریس متقارن $n \times n$ است که تقریب هسیان f است و $\Delta_k > 0$ شعاع ناحیه مطمئن می‌باشد. ناحیه مطمئن، ناحیه‌ای حول نقطه تکرار فعلی می‌باشد. انتخاب‌های متفاوت از ناحیه مطمئن و مدل‌های متفاوت، الگوریتم‌های ناحیه مطمئن متفاوتی را ارایه می‌دهد. یکی از مزایای روش‌های ناحیه مطمئن این است که در مقایسه با روش‌های جستجوی خطی B_k می‌تواند نامعین باشد و به‌وسیله فرمول شبه نیوتن به روزرسانی شود.

بعد از به دست آوردن گام آزمایشی d_k که یک جواب تقریبی یا دقیق زیرمساله (۲) است، الگوریتم‌های

ناحیه مطمئن با محاسبه نسبت $\rho_k = \frac{\text{کاهش واقعی}}{\text{کاهش پیش شده بینی}} = \frac{f(x_k) - f(x_k + d_k)}{\phi_k(0) - \phi_k(d_k)}$ مطابق با مقدار ρ_k به روزرسانی می‌کنند. حال اگر گام d_k موفق نباشد؛ یعنی اگر $f(x_k + d_k) > f(x_k)$ گام پذیرفته نمی‌شود و $x_{k+1} = x_k$ قرار می‌دهد و شعاع ناحیه مطمئن را کاهش داده و دوباره زیرمساله (۲) را حل می‌کند.

۲-۱ ادغام روش‌های ناحیه مطمئن با جستجوی خطی

حل زیرمساله ناحیه-مطمئن برای مسایل با مقیاس کوچک کاملاً مناسب است. با این حال اگر تعداد متغیرها زیاد باشد حل دوباره زیرمساله ناحیه مطمئن می‌تواند پرهزینه باشد؛ زیرا به یک یا بیش از یک دستگاه خطی به شکل $(B_k + \lambda I)d = -g_k$ نیاز دارد؛ ولی روش‌های جستجوی خطی به محاسبات خیلی کم‌تری برای تعیین یک نقطه آزمایشی جدید نیاز دارند.

بنابراین هدف این است که بتوانیم جستجوی خطی بازگشتی را در یک روش ناحیه مطمئن ادغام کنیم به طوری که از حل دوباره زیر مساله وقتی که گام مورد قبول قرار نمی گیرد، اجتناب کنیم. اگر چه ممکن است استفاده از روش های جستجوی خطی خواص همگرایی الگوریتم را تضعیف کند؛ بنابراین با دو حالت مشکل ساز روبه رو هستیم:

۱- وقتی که جهت جستجو در یک الگوریتم جستجوی خطی متعامد به جهت تندترین کاهش $-g_k$ باشد یک طول گام خیلی کوچک می تواند گام مورد قبول را به دست آورد. در برخی حالت ها خطاهای گرد کردن ممکن است باعث شود که جستجوی خطی شکست بخورد. در مواقع مشابه الگوریتم ناحیه مطمئن، ناحیه مطمئن را کاهش خواهد داد و گام آزمایشی جدید به جهت تندترین کاهش میل خواهد کرد. این خصیصه باعث می شود که الگوریتم نسبت به انتشار خطای گرد کردن بیش تر پایدار باشد.

۲- وقتی که جهت جستجو در یک الگوریتم جستجوی خطی یا گام آزمایشی در یک روش ناحیه مطمئن خیلی بزرگ باشد که ممکن است به وسیله یک ماتریس خیلی کوچک B_k ایجاد شود. در این حالت با کاهش ناحیه مطمئن، گام آزمایشی به دست آمده به جهت گام آزمایشی ناموفق قبلی نزدیک خواهد شد. در این حالت روش ناحیه مطمئن مانند روش جستجوی خطی بازگشتی رفتار خواهد کرد؛ اما هزینه محاسباتی افزایش خواهد یافت. پس در این حالت بهتر است یک جستجوی خطی بازگشتی انجام گیرد.

در نتیجه در روش بازگشتی باید جهت جستجو به حد کافی کاهشی باشد. می توان این روش را در امتداد یک خط مستقیم یا در امتداد یک مسیر منحنی وار انجام داد. پس یک راه حل برای مسأله (۲) پیدا کردیم که گام آزمایشی d_k همیشه یک جهت به اندازه کافی کاهشی برای تابع هدف می باشد. این بدان معنی است که زاویه بین d_k و $-g_k$ بیش از $\frac{\pi}{4}$ خواهد بود هرگاه g_k به صفر نزدیک شود و $\|d_k\|$ و $\|B_k\|$ از بالا کراندار باشند. این خصیصه باعث می شود نتایج همگرایی راضی کننده ای به دست آید.

۳ روش پیوندی جستجوی-مطمئن

در این قسمت، با استفاده از روش مبتنی بر ODE برای مسایل بهینه سازی نامقید، ارایه شده توسط مدرس و لیانگ^۱ [۲۱]، روش زیر فضا و ادغام تکنیک های جستجوی خطی و ناحیه مطمئن، الگوریتمی جدیدی را ارایه خواهیم کرد که جهت حل مساله (۱) به کار گرفته خواهد شد و در ادامه ویژگی های روش پیشنهادی مورد بحث قرار خواهد گرفت. مدرس و لیانگ، روش پیوندی مبتنی بر ODE برای حل مسایل بهینه سازی نامقید، که از تکنیک رانگ-کوتا با مرتبه-کم استفاده می کند، ارایه داده اند. الگوریتم ارایه شده در [۲۱] اساساً از استراتژی جستجوی خطی استفاده می کند. با توجه به مزایا و معایب هر یک از استراتژی های جستجوی خطی و ناحیه مطمئن، به ویژه موفقیت پیاده سازی روش SR1 به هنگام استفاده از روش ناحیه مطمئن در این بخش الگوریتمی را ارایه خواهیم داد تا ضمن استفاده از مزایای هر یک از این روش ها، با استفاده از الگوریتم بازگشتی دو حلقه ای با

¹Leong

159

مؤثر و برای حل دسته خاصی از مسایل بهینه‌سازی نامقید در مقیاس بزرگ طراحی گردیده است که در آن بیش تر مکان‌های حافظه $O(n)$ به ذخیره بردارهای n -بعدی نیاز دارند؛ لذا در این قسمت ارایه فشرده‌ای از فرمول به‌روزرسانی SR1 را خواهیم داشت.

برای به‌روزرسانی ماتریس $B_{i,k}(\lambda)$ که تقریبی برای ماتریس هسیان است از روند ذیل استفاده می‌کنیم:

$$B_{i,k+1}(\lambda) = B_{i,k}(\lambda) + \frac{(Y_{i,k}(\lambda) - B_{i,k}(\lambda)s_k)(Y_{i,k}(\lambda) - B_{i,k}(\lambda)s_k)^T}{(Y_{i,k}(\lambda) - B_{i,k}(\lambda))^T s_k},$$

و معکوس تقریب ماتریس هسیان نیز می‌تواند توسط رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$H_{i,k+1}(\lambda) = H_{i,k}(\lambda) + \frac{(s_k - H_{i,k}(\lambda)Y_{i,k}(\lambda))(s_k - H_{i,k}(\lambda)Y_{i,k}(\lambda))^T}{(s_k - H_{i,k}(\lambda)Y_{i,k}(\lambda))^T Y_{i,k}(\lambda)}, \quad (3)$$

که در آن:

$$H_{i,k+1}(\lambda_{k+1})Y_{i,k}(\lambda_{k+1}) = s_k,$$

$$Y_{i,k}(\lambda) := \frac{\lambda}{\mu_i} s_j + y_j, \quad i = 1, \dots, s.$$

و اگر $s_k^T y_k > 0$ ، $\lambda_{k+1} > 0$ داریم:

$$s_k^T Y_{i,k}(\lambda_{k+1}) > 0.$$

حال اگر قرار دهیم:

$$a = Y_{i,k}(\lambda)^T [B_{i,k}(\lambda)]^{-1} Y_{i,k}(\lambda), \quad b = Y_{i,k}(\lambda)^T s_k.$$

آنگاه می‌توان رابطه‌ی به‌روزرسانی معکوس تقریب ماتریس هسیان را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H_{i,k+1}(\lambda) = W_k^T (Y_{i,k}(\lambda)) W_k + \rho_k s_k s_k^T,$$

که در آن:

$$\begin{cases} W_k = I - Y_{i,k}(\lambda) u_k^T, \\ u_k = \frac{1}{\sqrt{b_k(b_k - a_k)}} s_k + \frac{\sqrt{b_k - a_k} - \sqrt{b_k}}{a_k \sqrt{b_k - a_k}} H_{i,k}(\lambda) Y_{i,k}(\lambda), \\ \rho_k = (b_k)^{-1}. \end{cases}$$

برای m مشخص شده توسط کاربر و یک ماتریس اولیه مثبت معین روش به روزرسانی L-SR1 را می‌توان توسط روش زیر به دست آورد. در این روش برای $m \leq k+1$ داریم:

$$\begin{aligned}
 H_{i,k+1}(\lambda) = & (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_1^T W_1^T) H_i(\lambda) (W_1 W_1 \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & + (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_1^T) \rho_i s_i s_i^T (W_1 \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & \vdots \\
 & + W_k^T \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T W_k \\
 & + \rho_k s_k s_k^T.
 \end{aligned}$$

و برای $k+1 > m$ روش L-SR1 را به صورت زیر خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
 H_{i,k+1}(\lambda) = & (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_{k-m+1}^T) H_i(\lambda) (W_{k-m+1} \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & + (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_{k-m+1}^T) \rho_{k-m+1} s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T (W_{k-m+1} \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & \vdots \\
 & + W_k^T \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T W_k \\
 & + \rho_k s_k s_k^T.
 \end{aligned}$$

برای راحتی می‌توان از نماد $\hat{m} = \min\{k, m-1\}$ در روابط بالا استفاده کرد و آن را به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned}
 H_{i,k+1}(\lambda) = & (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_{k-\hat{m}}^T) H_i(\lambda) (W_{k-\hat{m}} \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & + (W_k^T W_{k-1}^T \cdots W_{k-\hat{m}}^T) \rho_{k-\hat{m}} s_{k-\hat{m}} s_{k-\hat{m}}^T (W_{k-\hat{m}} \cdots W_{k-1} W_k) \\
 & \vdots \\
 & + W_k^T \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T W_k \\
 & + \rho_k s_k s_k^T.
 \end{aligned}$$

اگر ماتریس اولیه‌ای که برای شروع تقریب‌ها؛ یعنی H استفاده می‌شود یک ماتریس مثبت معین باشد، آنگاه می‌توان گفت که ماتریس‌هایی که روابط بالا را معرفی می‌کنند ماتریس‌های مثبت معین هستند.

با توجه به رابطه‌ی (۳) در می‌یابیم که اگر $(s_k - H_{i,k}(\lambda) Y_{i,k}(\lambda))^T Y_{i,k}(\lambda)$ برابر با صفر باشد، نمی‌توانیم از این روش استفاده کنیم و اگر مقدار آن خیلی کوچک باشد ممکن است، واگرا شود. برای این منظور ما از روش بدون حافظه برای به دست آوردن بهروزرسانی ماتریس تقریب استفاده می‌کنیم.

قضیه ۱.۳. پارامتر:

$$\sigma(A) = \frac{\xi_{\max}}{\det(A)^{\frac{1}{n}}},$$

را که در آن $\xi_{\max}$ بزرگ‌ترین مقدار ویژه ماتریس $n \times n$ است در نظر بگیرید. فرض کنید

$$\gamma_k = \frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} - \left[\left(\frac{s_k^T s_k}{s_k^T y_k} \right)^2 - \frac{s_k^T s_k}{y_k^T y_k} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4)$$

آنگاه معکوس ماتریس SR1 که از به روز رسانی $\gamma_k I$ به دست آمده و به صورت زیر است:

$$H_{k+1} = \gamma_k I + \frac{(s_k - \gamma_k y_k)(s_k - \gamma_k y_k)^T}{y_k^T (s_k - \gamma_k y_k)}$$

یک جواب منحصر به فرد:

$$\min \sigma(H_{k+1}^{-1})$$

$$s.t. H_{k+1}^{-1} s_k = y_k,$$

و H_{k+1}^{-1} یک ماتریس مثبت معین است. برهان [۲۱].

حال می توان با استفاده از مطلب فوق بعد از محاسبه ماتریس به روز رسانی شده جهت جستجو را به صورت زیر به دست آورد:

$$d_k = -\gamma_{k-1} g_k$$

$$+\gamma_{k-1} \left(\frac{s_{k-1}^T g_k - \gamma_{k-1} y_{k-1}^T g_k}{y_{k-1}^T s_{k-1} - \gamma_{k-1} y_{k-1}^T y_{k-1}} \right) y_{k-1}$$

$$-\left(\frac{s_{k-1}^T g_k - \gamma_{k-1} y_{k-1}^T g_k}{y_{k-1}^T s_{k-1} - \gamma_{k-1} y_{k-1}^T y_{k-1}} \right) s_{k-1}.$$

که در آن γ_{k-1} در رابطه (۴) داده شده است. حال یک رویکرد بازگشتی را جهت محاسبه مؤثرتر $H.v$ ارائه می دهیم.

۲-۳ الگوریتم پیشنهادی

الگوریتم ۱-۳ (الگوریتم بازگشتی دو حلقه ای (L-SR1))

ورودی ها: جفت بردارهای مورد استفاده در حافظه محدود $\{s_j, y_j\}$ ، مقدار ویژه μ_i ، λ_{k+1} ، m ، k ، q و

ماتریس هسیان اولیه $H_{i,k}(\lambda_k)$.

```

 $\bar{m} = \min\{k, m-1\};$ 
 $q \leftarrow v;$ 
for  $j = k-1, k-2, \dots, k-m$ 
  Compute  $Y_{i,j}(\lambda_{k+1})$  using :
    
$$Y_{i,j}(\lambda_{k+1}) = \frac{\lambda_{k+1}}{\mu_i} s_j + y_j.$$

     $\alpha_j \leftarrow u_j^T q;$ 
     $q \leftarrow q - \alpha_j Y_{i,j}(\lambda_{k+1});$ 
     $p_i \leftarrow q;$ 
end(for)
if  $k \leq m$ 
   $r \leftarrow H_*(\lambda_*)$ 
else
   $r \leftarrow H_{i,k}(\lambda_{k+1})q;$ 
for  $j = k-\hat{m}, \dots, k-1$ 
   $\beta_j \leftarrow Y_{i,j}(\lambda_{k+1})r;$ 
   $r \leftarrow r - \beta_j u_j;$ 
if  $j < k-1$ 
   $r \leftarrow r + \rho_j s_j^T p_{j+1} s_j;$ 
else
   $r \leftarrow r + \rho_j (s_j^T g_{j+1} s_j);$ 
end(for)
stop with result  $H_{i,k}(\lambda_k)q =: r.$ 

```

با توجه به مطالب فوق در صورتی که H را به عنوان تقریبی برای معکوس ماتریس هسیان، g را به عنوان گرادیان تابع هدف و y را به عنوان تفاضل گرادیان تابع هدف در دو تکرار فعلی و قبلی لحاظ کنیم، حاصل عبارت‌های $H.y$ و $H.g$ می‌توانند به ترتیب با جایگزین نمودن v با g و u با y (v و u از الگوریتم فوق محاسبه می‌شوند) به دست آیند؛ بنابراین u باید در هر تکرار طوری ذخیره شود که در تکرار بعدی بتواند مورد استفاده قرار گیرد. علاوه بر این، نیازمند ذخیره نمودن s ، y و ρ در هر تکرار هستیم.

$$S_k = [s_{k-m}, \dots, s_{k-2}, s_{k-1}], \quad Y_k = [y_{k-m}, \dots, y_{k-2}, y_{k-1}],$$

$$\rho_k = [\rho_{k-m}, \dots, \rho_{k-2}, \rho_{k-1}], \quad U_k = [u_{k-m}, \dots, u_{k-2}, u_{k-1}].$$

حال در این قسمت الگوریتمی را به صورت زیر ارائه می‌کنیم. با توجه به اینکه در روش پیشنهادی از ادغام روش‌های جستجوی خطی و ناحیه مطمئن استفاده شده است آن را الگوریتم پیوندی جستجوی مطمئن می‌نامیم.

الگوریتم ۲-۳. الگوریتم پیوندی جستجوی مطمئن^۱ (HTSA):

گام اول. برای نقطه اولیه داده شده x_0 و $\varepsilon > 0$ ، $\delta \in (0, 1)$ ، $\eta \in (0, 0.1)$ ، $M \geq 2$ ، $h_0 > 0$ ،
 $k := 0$ و ماتریس اولیه $H_0(\lambda_0)$ قرار دهید: $W_0 = \nabla f(x_0) = g_0 \in R^{n \times 1}$
گام دوم. شرط توقف. اگر $\|\nabla f(x_k)\| \leq \varepsilon$ آنگاه روند الگوریتم را متوقف کنید در غیر این صورت به گام سوم بروید.

گام سوم. محاسبه گام آزمایشی. زیر مساله ناحیه مطمئن را جهت مشخص نمودن یک گام آزمایشی d_k که در شرطهای زیر صدق می کند، حل کنید.

گام چهارم. پذیرش گام آزمایشی. برای پارامتر $\rho_k = \frac{ared_k}{pred_k} = \frac{f(x_k) - f(x_k + d_k)}{-(g_k^T d_k + \frac{1}{2} d_k^T H_k^{-1} d_k)}$ اگر $\rho_k > \eta$ قرار

دهید $x_{k+1} = x_k + d_k$ و برو به گام پنجم (استفاده از ایده روش زیر فضا)، در غیر این صورت برو به گام هشتم.
گام پنجم. پارامتر $m_k = \min\{k, M\}$ را تعریف و قرار می دهیم: $V_k = \{g_k, g_{k-1}, \dots, g_{k-m_k}\} \in \mathbb{R}^{n \times m_k+1}$
 حال اگر ماتریس $h_k V_k^T H_k^{-1} V_k + I$ معین مثبت باشد، به گام بعدی می رویم در غیر این صورت l_k را کوچک ترین عدد صحیح مثبت قرار دهید که معین مثبت باشد و لذا $h_k = 2^{-l_k} h_k$

گام ششم. دستگاه معادلات خطی $(h_k V_k^T H_k^{-1} V_k + I)y = -h_k V_k^T \nabla f(x_k)$ را جهت محاسبه y_k حل کنید.
گام هفتم. بردار $d_k = V_k y_k$ را محاسبه کرده اگر $f(x_k + d_k) \leq f(x_k) + \delta g_k^T d_k$ آنگاه $x_{k+1} = x_k + d_k$ و $h_{k+1} = \tau_1 h_k$ و برو به گام نهم، در غیر این صورت برو به گام هشتم.

گام هشتم. قرار دهید $h_{k+1} = \tau_1 h_k$ و $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ و جهت جستجو و طول گام را توسط مراحل زیر محاسبه کنید و h_k را توسط رابطه $h_{k+1} = \frac{c}{\|\nabla f(x_k)\|}$ بروز رسانی کنید و سپس قرار دهید $\lambda_{k+1} = \frac{1}{h_{k+1}}$ و بروید به گام آخر.

محاسبه جهت جستجو:

گام ۴-۱. با مقادیر اولیه $x_{k+1}^{(c)}$ ، $\lambda_k > 0$ و بردارهای $\{s_i\}$ و $\{y_i\}$ و d_k را عدد صفر در نظر بگیرید.

گام ۴-۲. اگر $d_n \leq 0$ ، آنگاه متوقف شوید.

گام ۴-۳. $x_{k+1}^{(j+1)}$ را با استفاده از رابطه ی زیر و استفاده از الگوریتم بازگشتی دو حلقه ای L-SR1 محاسبه کنید.

$$x_{k+1}^{(1)} = x_{k+1}^{(c)} - (\lambda_k I + \nabla^2 f(x_{k+1}^{(c)}))^{-1} (\lambda_k (x_{k+1}^{(c)} - x_k) + \nabla f(x_{k+1}^{(c)}))$$

گام ۴-۴. قرار دهید $d_k = x_{k+1}^{(j+1)} - x_k$ و $d_n = d_k^T g_k$

محاسبه طول گام α_k : با استفاده از شرایط زیر (شرایط ولف) طول گام را بیابید:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \zeta_1 \alpha_k g_k^T d_k,$$

¹ Hybrid Trust-Search Algorithm

$$\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \zeta_k g_k^T d_k,$$

گام نهم. H_k را توسط فرمول SR1 به H_{k+1} به روزرسانی کنید.

گام دهم. قرار دهید $k := k + 1$ و به گام دوم بروید.

استفاده از الگوریتم فوق بعد دستگاه خطی $(h_k V_k^T H_k^{-1} V_k + I)y = -h_k V_k^T \nabla f(x_k)$ را از n به $m_k + 1$ تقلیل داده و بنابراین حل دستگاه فوق در حالتی که $m < n$ به مراتب آسان‌تر خواهد بود. در این روش عملیات محاسباتی نیز برای مسایل با ابعاد بزرگ کاهش خواهد یافت. در الگوریتم فوق زمانی که تعداد متغیرها کم باشد، محاسبه و ذخیره ماتریس H_k کم هزینه می‌باشد؛ بنابراین بهتر است H_k توسط دستور SR1 محاسبه شود. با این حال ذخیره‌سازی و فرض‌های محاسباتی نسبت به n^2 افزایش می‌یابد؛ بنابراین n بیش از حد بزرگ می‌شود و در این حالت بهتر است که از نمایش فشرده آن؛ یعنی استفاده از الگوریتم بازگشتی دو حلقه ای L-SR1 استفاده نمود.

با توجه به توضیحات اشاره شده در قسمت‌های قبل و دقت در الگوریتم ارایه شده ملاحظه می‌شود که ماتریس V_k که با توجه به اطلاعات مراحل قبل به دست آمده است، علاوه بر اینکه نقش اساسی در ساده‌سازی دستگاه معادلات خطی دارد، می‌تواند باعث همگرایی پایدار در محاسبات عملی شود. همچنین انتخاب‌های دیگری نیز از ماتریس V_k می‌توان برای به دست آوردن جواب‌های بهتر داشت.

۴ نتایج عددی

در این قسمت، نتایج عددی به دست آمده از رفتار الگوریتم پیشنهادی را ارایه می‌دهیم. همچنین، مقایسه‌ای با الگوریتم‌های L-BFGS و FRSCG جهت نشان دادن توانایی الگوریتم پیشنهادی خواهیم داشت. الگوریتم‌ها بر روی ۵۲ مساله آزمون استاندارد از مجموعه مسایل آزمون استاندارد ارایه شده در [۲۲]، پیاده‌سازی شده است. همچنین نقاط اولیه برای مجموعه مسایل استاندارد همانند نقاط آغازی در مراجع فوق در نظر گرفته شده که در ضمیمه نیز ارایه شده است. در کل ۱۵۶ اجرا برای هر الگوریتم انجام شده است. برای هر تابع، ۳ بعد مختلف، ۱۰۰۰، ۵۰۰۰ و ۱۰۰۰۰ در نظر گرفته شده است.

زبان برنامه نویسی مورد استفاده فورترن ۷۷^۱ می‌باشد، از کامپیوتر با مشخصات Intel Core ® Pentium با رم ۴ Gb جهت اجرا و پیاده‌سازی استفاده شده است. تیرانس توقف مورد استفاده در تمامی الگوریتم‌ها 10^{-5} می‌باشد. در تمامی حالت‌ها دقت مضاعف محاسباتی^۲ لحاظ شده است. همچنین در اجرای تمامی الگوریتم‌ها شکست را به این معنی در نظر خواهیم گرفت که شرط توقف پس از حداکثر ۱۰۰۰ تکرار برقرار نباشد؛ بنابراین پس از تکرار ۱۰۰۰ام اجرای الگوریتم را متوقف و به عنوان "شکست"^۳ لحاظ خواهد شد.

پارامترهای مورد استفاده در الگوریتم $h_1 = 1$ ، $\delta = 0/0$ ، $\zeta_1 = 10^{-4}$ ، $\zeta_2 = 0/9$ ، $\xi_2 = 0/9$ ، $\delta_1 = 10^{-4}$ ، $\tau_1 = 0/5$ و $\tau_2 = 2$ می‌باشند.

^۱Fortran g77

^۲Double Precision Arithmetic

^۳Failure

از الگوریتم‌های IMPBOT، LBFGS و FRSCG جهت مقایسه با الگوریتم پیشنهادی استفاده شده است. این الگوریتم‌ها به ترتیب در منابع [۳] و [۹] ارایه شده‌اند.

نتایج دقیق الگوریتم‌ها در جدول ۱ ارایه شده است، در جدول ۱، n_i و $n_{f/g}$ به ترتیب تعداد تکرار و تعداد فراخوانی‌های تابع/گرادیان می‌باشد. نتایج عددی به دست آمده نشان می‌دهند که الگوریتم پیشنهادی در مقایسه با الگوریتم‌های IMPBOT و FRSCG نتایج قابل قبولی را علی‌الخصوص برای مسایل مقیاس بزرگ به دست می‌دهد و در بسیاری از موارد با الگوریتم L-BFGS در رقابت می‌باشد.

جدول ۱. نتایج آزمون برای روش‌های HTSA, IMPBOT, L-BFGS, FRSCG

نام مساله	بعد	HTSA		IMPBOT		L-BFGS		FRSCG	
		n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$
Freudenstein & Roth	۱۰۰۰	۱۸	۲۴	۲۶	۲۷	۲۰	۲۵	۴۶	۱۷۴
	۵۰۰۰	۱۹	۳۴	۳۱	۲۹	۲۲	۳۴	۸۴	۱۹۸
	۱۰۰۰۰	۲۲	۲۶	۳۱	۳۲	۲۴	۳۰	۷۰	۳۰۳
Trigonometric	۱۰۰۰	۳۷	۳۹	۴۸	۵۱	۴۳	۴۵	۱۷۱	۲۳۰
	۵۰۰۰	۳۵	۳۶	۴۵	۵۶	۴۱	۴۷	۱۸۰	۱۰۷
	۱۰۰۰۰	۳۴	۲۸	۴۶	۶۳	۳۸	۳۹	۲۷۵	۳۲۴
Rosenbrock	۱۰۰۰	۲۷	۵۳	۴۴	۶۶	۳۱	۵۸	۷۴	۱۱۸
	۵۰۰۰	۲۸	۴۸	۵۳	۸۷	۳۵	۵۵	۹۷	۱۶۵
	۱۰۰۰۰	۳۲	۴۵	۵۹	۸۹	۳۸	۵۷	۱۰۷	۱۸۹
White & Holst	۱۰۰۰	۳۶	۵۸	۵۳	۷۴	۴۴	۶۴	۷۸	۱۴۶
	۵۰۰۰	۴۰	۶۷	۴۶	۸۸	۴۷	۷۷	۵۳	۹۷
	۱۰۰۰۰	۳۱	۶۱	۴۴	۷۲	۳۸	۶۹	۴۸	۸۷
Beale	۱۰۰۰	۲۰	۲۹	۳۱	۲۷	۲۳	۳۶	۱۹	۳۵
	۵۰۰۰	۱۳	۲۰	۳۳	۳۳	۱۸	۲۵	۱۹	۳۶
	۱۰۰۰۰	۲۲	۳۲	۳۸	۴۲	۲۸	۴۰	۲۹	۵۴
Penalty	۱۰۰۰	۳۷	۴۵	۴۳	۵۷	۴۵	۵۵	۲۴	۴۰
	۵۰۰۰	۳۸	۴۳	۴۸	۵۷	۴۴	۵۷	۲۵	۴۱
	۱۰۰۰۰	۴۳	۵۱	۵۵	۶۴	۵۲	۶۶	۲۴	۴۵
Raydan ۱	۱۰۰۰	۱۸۷	۲۵۱	۲۵۲	۳۰۱	۲۲۸	۲۴۵	۳۴۱	۴۰۰
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
Raydan ۲	۱۰۰۰	۵	۱۰	۸	۹	۷	۹	۴	۹
	۵۰۰۰	۵	۱۰	۸	۹	۷	۹	۴	۹
	۱۰۰۰۰	۸	۱۳	۹	۱۱	۷	۱۰	۴	۹
Diagonal ۱	۱۰۰۰	۱۹۵	۲۴۶	۳۰۴	۴۲۷	۲۵۴	۲۶۸	۴۹۳	۸۲۹
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
Diagonal ۲	۱۰۰۰	۱۷۱	۱۸۳	۱۹۸	۲۲۳	۱۶۳	۱۹۳	۲۵۳	۳۲۵
	۵۰۰۰	۳۶۷	۳۸۹	۴۳۷	۴۳۱	۳۹۸	۴۴۱	۵۳۷	۶۶۸
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-

ادامه جدول ۱. نتایج آزمون برای روش‌های FRSCG, L-BFGS, IMPBOT, HTSA

نام مساله	بعد	HTSA		IMPBOT		L-BFGS		FRSCG	
		n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$
Perturbed Quadratic	۱۰۰۰	۲۸۱	۳۰۴	۳۰۳	۳۲۹	۲۹۵	۳۲۰	۳۸۴	۴۳۹
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
G. Tridiagonal ۱	۱۰۰۰	۲۷	۴۲	۳۹	۴۷	۳۴	۴۴	۶۱	۹۲
	۵۰۰۰	۲۶	۵۱	۳۷	۵۶	۳۲	۵۴	۲۳	۵۲
	۱۰۰۰۰	۲۹	۵۶	۴۱	۵۹	۳۶	۵۶	۹۸	۶۱۹
Tridiagonal ۱	۱۰۰۰	۲۱	۳۱	۳۰	۳۵	۲۷	۳۵	۲۸	۵۵
	۵۰۰۰	۲۸	۴۲	۳۴	۴۶	۳۳	۴۴	۱۰	۲۲
	۱۰۰۰۰	۲۶	۳۵	۲۷	۳۹	۲۷	۳۷	۳۸	۷۴
Three Expo Terms	۱۰۰۰	۱۴	۱۶	۱۵	۲۰	۱۴	۱۸	۱۷	۳۰
	۵۰۰۰	۱۷	۲۰	۲۱	۲۲	۱۹	۲۲	۲۳	۴۰
	۱۰۰۰۰	۲۰	۲۲	۱۴	۲۴	۱۲	۲۴	۲۸	۱۰۸
G. Tridiagonal ۲	۱۰۰۰	۷۱	۹۱	۸۶	۱۰۵	۸۲	۱۰۰	۱۹۳	۲۲۸
	۵۰۰۰	۷۴	۹۴	۹۱	۱۰۸	۸۶	۱۰۳	۱۱۷	۱۵۲
	۱۰۰۰۰	۹۱	۱۱۴	۱۰۶	۱۲۷	۱۰۲	۱۲۲	۳۶۴	۴۸۰
NONDIA	۱۰۰۰	۲۰	۳۱	۲۷	۳۵	۲۴	۳۳	۱۲	۲۵
	۵۰۰۰	۱۴	۲۳	۱۹	۲۴	۱۷	۲۴	۷	۱۴
	۱۰۰۰۰	۱۷	۲۳	۱۹	۳۵	۱۷	۳۲	۷	۱۴
DQDRTIC	۱۰۰۰	۳۴	۴۵	۴۲	۵۰	۴۱	۴۹	۶	۱۳
	۵۰۰۰	۲۲	۳۱	۳۶	۴۷	۲۷	۳۵	۷	۱۵
	۱۰۰۰۰	۳۳	۴۵	۴۳	۵۳	۳۸	۴۹	۷	۱۵
DENSCHNB	۱۰۰۰	۷	۱۴	۱۷	۱۹	۱۳	۱۵	۸	۱۷
	۵۰۰۰	۶	۱۳	۱۴	۱۸	۱۲	۱۴	۸	۱۷
	۱۰۰۰۰	۹	۱۸	۱۸	۲۰	۱۴	۱۸	۹	۱۹
DENSCHNF	۱۰۰۰	۱۵	۳۱	۲۲	۳۷	۲۱	۳۶	۱۴۵	۴۳۸
	۵۰۰۰	۱۶	۳۳	۲۳	۳۹	۲۰	۳۴	۱۳۲	۴۹۱
	۱۰۰۰۰	۲۱	۳۸	۲۹	۴۴	۲۶	۴۲	۹۹	۵۰۶
SINQUAD	۱۰۰۰	۱۳۷	۲۵۹	۱۶۸	۲۸۴	۱۵۷	۲۷۵	۲۵۹	۴۵۷
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-

ادامه جدول ۱. نتایج آزمون برای روش‌های HTSA, IMPBOT, L-BFGS, FRSCG

نام مساله	بعد	HTSA		IMPBOT		L-BFGS		FRSCG	
		n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$
PPQ ^۱	۱۰۰۰	۲۳۰	۲۸۹	۲۵۵	۳۰۳	۲۴۶	۲۹۸	۶۰۷	۶۸۸
	۵۰۰۰	۹۴	۱۳۴	۱۱۹	۱۵۲	۱۱۰	۱۴۵	۲۵۷	۴۴۰
	۱۰۰۰۰	۵۷	۹۵	۸۵	۱۰۹	۷۵	۱۰۳	۳۹	۶۹
Broyden Tridiagonal	۱۰۰۰	۳۳	۵۹	۴۲	۶۴	۳۸	۶۲	-	-
	۵۰۰۰	۵۴	۸۲	۶۷	۸۹	۶۱	۸۵	۲۷۵	۳۱۴
	۱۰۰۰۰	۵۲	۶۹	۵۸	۷۴	۵۶	۷۲	۱۸۳	۲۲۰
Almost Perturbed Quadratic	۱۰۰۰	۲۶۵	۳۰۳	۲۸۲	۳۰۶	۲۷۸	۳۰۵	۷۷۲	۸۲۶
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
EDENSCH	۱۰۰۰	۲۳	۴۷	۲۶	۵۴	۲۶	۵۱	۳۰	۵۶
	۵۰۰۰	۲۷	۶۱	۳۱	۶۳	۳۰	۶۲	۴۳	۱۸۳
	۱۰۰۰۰	۳۲	۷۷	۳۵	۸۱	۳۵	۷۹	۴۳	۷۴
LIARWHD	۱۰۰۰	۲۹	۴۸	۳۷	۵۲	۳۴	۵۰	۱۱۶	۲۳۰
	۵۰۰۰	۳۳	۵۶	۴۲	۶۱	۳۸	۵۹	۷۳	۱۴۱
	۱۰۰۰۰	۳۸	۵۹	۴۵	۶۳	۴۲	۶۱	۹۱	۱۷۳
Diagonal ϵ	۱۰۰۰	۶	۹	۸	۱۰	۷	۹	۴	۹
	۵۰۰۰	۶	۹	۸	۱۰	۷	۹	۴	۹
	۱۰۰۰۰	۶	۹	۸	۱۰	۷	۱۰	۴	۹
DIXMAANF	۱۰۰۰	۱۱۴	۱۲۷	۱۳۹	۱۴۴	۱۳۲	۱۴۰	۲۲۹	۲۶۵
	۵۰۰۰	۲۳۵	۲۶۲	۲۶۱	۲۷۲	۲۵۳	۲۶۷	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
Diagonal ϵ	۱۰۰۰	۶	۱۳	۷	۱۳	۶	۱۲	۶	۱۲
	۵۰۰۰	۶	۱۳	۷	۱۳	۶	۱۲	۷	۱۴
	۱۰۰۰۰	۶	۱۳	۷	۱۳	۶	۱۲	۲۲	۴۱
Diagonal δ	۱۰۰۰	۵	۷	۶	۹	۵	۸	۴	۹
	۵۰۰۰	۵	۷	۶	۹	۵	۸	۴	۹
	۱۰۰۰۰	۵	۷	۵	۸	۴	۸	۴	۹
Himmelblau	۱۰۰۰	۱۳	۲۶	۱۵	۳۰	۱۴	۲۸	۱۶	۳۰
	۵۰۰۰	۱۴	۲۸	۱۶	۲۷	۱۵	۲۷	۱۹	۳۶
	۱۰۰۰۰	۱۶	۳۲	۲۱	۳۱	۱۹	۳۲	۲۱	۳۷
G.PSC ^۱	۱۰۰۰	۷۹	۱۰۲	۹۹	۱۱۹	۹۳	۱۱۳	۲۳۱	۳۷۳
	۵۰۰۰	۱۱۲	۱۳۷	۱۳۰	۱۵۲	۱۲۵	۱۴۹	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-

ادامه جدول ۱. نتایج آزمون برای روش‌های HTSA, IMPBOT, L-BFGS, FRSCG

نام مساله	بعد	HTSA		IMPBOT		L-BFGS		FRSCG	
		n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$
PSC _۱	۱۰۰۰	۱۰	۱۸	۲۳	۳۰	۱۸	۲۰	۱۱	۲۳
	۵۰۰۰	۱۱	۱۸	۲۵	۳۶	۱۹	۲۱	۱۱	۲۳
	۱۰۰۰۰	۱۹	۲۶	۲۹	۴۰	۱۹	۲۴	۳۵	۸۰۷
Maratos	۱۰۰۰	۶۸	۱۱۰	۷۷	۱۱۹	۷۴	۱۱۶	۶۲۸	۸۴۹
	۵۰۰۰	۵۹	۹۸	۶۴	۱۰۲	۶۳	۱۰۰	-	-
	۱۰۰۰۰	۴۷	۷۷	۵۴	۸۳	۵۲	۸۲	۶۲۹	۹۴۸
Cliff	۱۰۰۰	۵۱	۵۸	۵۹	۶۵	۵۶	۶۲	۵۷	۹۳
	۵۰۰۰	۵۶	۶۵	۶۱	۶۹	۵۹	۶۷	۲۵	۵۲
	۱۰۰۰۰	۶۱	۷۵	۶۰	۶۸	۶۰	۷۰	۴۴	۸۸
Wood	۱۰۰۰	۲۲۶	۳۰۷	۲۱۲	۳۰۳	۲۳۲	۳۱۲	۷۰	۱۳۲
	۵۰۰۰	۲۳۷	۲۷۱	۲۲۳	۲۷۸	۲۲۱	۲۷۸	۹۴	۱۷۸
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۸۱	۱۵۵
Hiebert	۱۰۰۰	۷۴	۱۳۳	۸۵	۱۴۲	۸۲	۱۴۰	۱۰۹	۲۰۵
	۵۰۰۰	۵۸	۱۰۲	۶۸	۱۱۱	۶۵	۱۰۹	۸۴	۱۵۱
	۱۰۰۰۰	۹۱	۱۶۰	۱۰۲	۱۶۹	۹۸	۱۶۷	۶۹	۱۳۱
QF _۱	۱۰۰۰	۲۶۴	۲۷۸	۲۶۶	۲۹۴	۲۶۷	۲۸۸	۷۲۸	۷۸۳
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
QP _۱	۱۰۰۰	۱۸	۲۲	۱۹	۲۹	۱۸	۲۰	۱۲	۲۸
	۵۰۰۰	۲۶	۲۸	۲۶	۳۳	۲۴	۲۶	-	-
	۱۰۰۰۰	۲۶	۲۹	۲۶	۳۳	۲۴	۲۶	-	-
QP _۲	۱۰۰۰	۳۸	۷۱	۴۵	۸۲	۴۲	۷۷	-	-
	۵۰۰۰	۵۴	۸۵	۶۱	۹۴	۵۸	۸۹	۲۴۸	۳۷۲
	۱۰۰۰۰	۳۲	۶۱	۳۹	۶۹	۳۶	۶۶	۲۸۵	۴۲۵
QF _۲	۱۰۰۰	۳۲۱	۳۸۷	۳۵۱	۳۷۷	۳۴۱	۳۷۴	-	-
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
EP _۱	۱۰۰۰	۵	۸	۴	۷	۴	۷	۲	۵
	۵۰۰۰	۵	۸	۴	۷	۴	۷	۳	۶
	۱۰۰۰۰	۵	۸	۴	۷	۴	۷	۵	۹
ARWHEAD	۱۰۰۰	۱۳	۲۴	۲۲	۲۸	۱۸	۲۷	۲۴	۴۷
	۵۰۰۰	۱۴	۲۸	۱۰	۳۳	۱۱	۳۱	۳۵	۲۳۰
	۱۰۰۰۰	۱۶	۳۸	۱۲	۴۰	۱۳	۳۹	-	-

ادامه جدول ۱. نتایج آزمون برای روش‌های HTSA, IMPBOT, L-BFGS, FRSCG

نام مساله	بعد	HTSA		IMPBOT		L-BFGS		FRSCG	
		n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$	n_i	$n_{f/g}$
DIXMAANA	۱۰۰۰	۸	۱۰	۱۱	۱۳	۱۰	۱۲	۱۱	۲۲
	۵۰۰۰	۸	۱۰	۱۱	۱۳	۱۰	۱۲	۱۱	۲۲
	۱۰۰۰۰	۸	۱۰	۱۱	۱۳	۱۰	۱۲	۱۲	۲۴
DIXMAANB	۱۰۰۰	۱۲	۱۶	۱۷	۱۹	۱۵	۱۸	۱۲	۲۱
	۵۰۰۰	۱۳	۱۸	۱۸	۲۰	۱۶	۱۹	۱۲	۲۱
	۱۰۰۰۰	۱۳	۱۸	۱۸	۲۰	۱۶	۱۹	۱۲	۲۱
DIXMAANC	۱۰۰۰	۱۵	۲۰	۱۴	۱۸	۱۴	۱۸	۱۵	۲۷
	۵۰۰۰	۱۶	۲۳	۱۴	۱۶	۱۴	۱۸	۱۶	۲۸
	۱۰۰۰۰	۱۶	۲۳	۱۶	۱۸	۱۶	۱۸	۱۵	۲۶
DIXMAANE	۱۰۰۰	۱۵۱	۱۷۳	۱۶۵	۱۷۳	۱۶۰	۱۷۴	۳۵۲	۳۸۱
	۵۰۰۰	۳۸۹	۴۱۱	۴۰۲	۴۵۰	۴۰۶	۴۳۴	۷۱۲	۷۴۳
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۸۳۹	۸۷۱
DIXMAANG	۱۰۰۰	۱۳۳	۱۴۰	۱۴۶	۱۵۳	۱۴۱	۱۴۸	۲۷۳	۳۰۳
	۵۰۰۰	۲۲۳	۲۴۵	۲۵۵	۲۶۳	۲۴۴	۲۶۰	۶۷۱	۷۰۲
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۷۹۳	۸۲۵
DIXMAANH	۱۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۵۹۹	۶۶۳
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۷۶۳	۸۴۹
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
DIXMAANI	۱۰۰۰	۱۲۳	۱۳۸	۱۴۷	۱۶۱	۱۳۹	۱۵۳	۳۱۲	۳۴۳
	۵۰۰۰	۲۶۵	۲۷۸	۲۹۷	۳۱۸	۲۸۶	۳۰۴	۶۷۴	۷۰۵
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	۸۸۹	۹۲۱
ENGVAL ^۱	۱۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۵۰۰۰	۲۳	۴۴	۲۶	۵۱	۲۵	۴۸	۲۸	۴۹
	۱۰۰۰۰	۲۱	۴۶	۲۶	۴۸	۲۴	۴۷	۴۲	۶۶
SQ ^۱	۱۰۰۰	۲۳۹	۲۵۵	۲۳۸	۲۵۹	۲۴۱	۲۵۷	۸۸۶	۹۵۱
	۵۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-
SQ ^۲	۱۰۰۰	۱۲۰	۲۰۹	۱۳۳	۲۱۳	۱۲۸	۲۱۱	-	-
	۵۰۰۰	۳۱۵	۳۸۸	۳۳۵	۴۱۷	۳۲۷	۴۰۷	-	-
	۱۰۰۰۰	-	-	-	-	-	-	-	-

جدول ۲. نسبت نتایج الگوریتم HTSA به IMPBOT

الگوریتم	HTSA	
	تعداد تکرارها	تعداد فراخوانی‌های تابع
میانگین حسابی	۰/۹۲	۰/۹۰
میانگین هندسی	۰/۸۴	۰/۸۴

جدول ۳. نسبت نتایج الگوریتم HTSA به L-BFGS

الگوریتم	HTSA	
	تعداد تکرارها	تعداد فراخوانی‌های تابع
میانگین حسابی	۰/۹۵	۰/۹۲
میانگین هندسی	۰/۹۱	۰/۸۵

جدول ۴. نسبت نتایج الگوریتم HTSA به FRSCG

الگوریتم	HTSA	
	تعداد تکرارها	تعداد فراخوانی‌های تابع
میانگین حسابی	۰/۷۷	۰/۷۴
میانگین هندسی	۰/۷۱	۰/۶۹

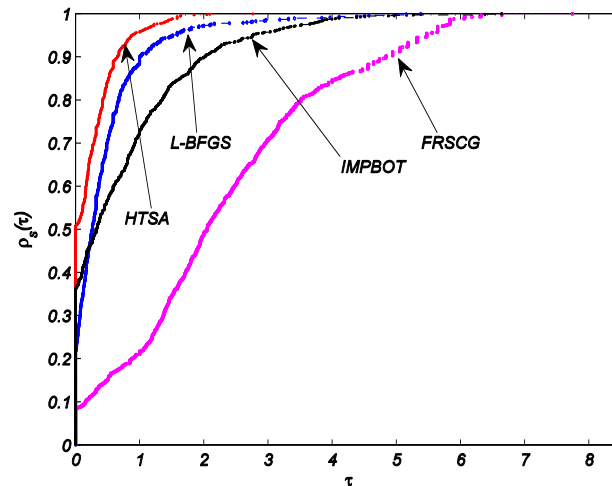
خلاصه نتایج در جدول‌های ۲، ۳ و ۴ ارائه شده است. نتایج ارائه شده در این جداول بیان می‌کند که الگوریتم HTSA به طور موثری عملکرد الگوریتم IMPBOT را بهبود بخشیده است. بهبود HTSA بر روی IMPBOT به طور متوسط ۸ تا ۱۱٪ در تعداد تکرار می‌باشد و ۱۰ الی ۱۶٪ به طور میانگین در تعداد فراخوانی تابع/گرادیان می‌باشد. با توجه به جدول ۳-۴ بهبود الگوریتم HTSA نسبت به الگوریتم L-BFGS به طور متوسط ۵ الی ۹٪ با در نظر گرفتن تعداد تکرارهای مورد نیاز جهت رسیدن به جواب و ۸ الی ۱۲٪ در تعداد محاسبات تابع/گرادیان می‌باشد. این مقادیر نسبت به الگوریتم FRSCG به طور متوسط ۲۳ الی ۲۹٪ در تعداد تکرار و ۲۶ الی ۳۱٪ در تعداد محاسبات تابع/گرادیان در جدول ۴ تغییر یافته است.

علاوه بر این از معیار دیگری نیز جهت بررسی عملکرد الگوریتم پیشنهادی در مقایسه با سایر الگوریتم‌ها استفاده شده است، این معیار که به نمودار عملکرد^۱ نیز معروف است توسط دولان و مور [۲۳] ارائه شده است و عملکرد هر الگوریتم را در تمامی اجراها بر روی مجموعه مسایل آزمون به صورت گرافیکی نشان می‌دهد و برتری بیشتری به نسبت سایر ابزارهای تعیین معیار موجود برای آزمون مجموعه‌های بزرگ دارد.

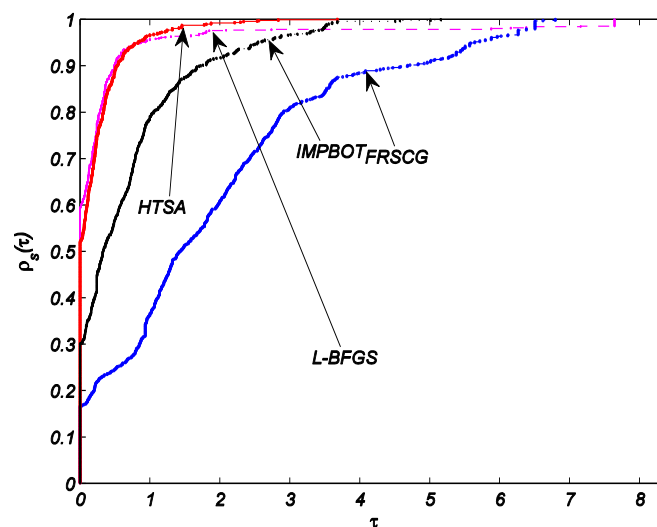
نسبت عملکرد به صورت $r_{p,s} = \frac{l_{p,s}}{l_p^*}$ تعریف می‌شود، که $l_{p,s}$ تعداد محاسبات مورد نیاز تابع هدف برای حل مساله p توسط الگوریتم s می‌باشد، و l_p^* نشان دهنده کم‌ترین دفعات مورد نیاز جهت محاسبه تابع هدف در هر الگوریتم می‌باشد؛ لذا برای هر p و s داریم: $r_{p,s} \geq 1$. هرگاه الگوریتم قادر به حل مساله‌ای باشد برای نسبت $r_{p,s}$ عدد بزرگی مانند M تخصیص می‌یابد به طوری که برای هر p و s ، $r_{p,s} < M$ ؛ بنابراین نمودار عملکرد را به صورت $\rho_s(\tau) = \frac{r_{p,s} \leq \tau}{\text{Number of all problems}}$ می‌توان تعریف کرد. برای جزئیات بیش‌تر در خصوص نمودار عملکرد به [۲۳] مراجعه کنید.

^۱Performance Profile

در شکل‌های ۱ و ۲ نمودار عملکرد الگوریتم‌های HTSA، IMPBOT، L-BFGS، FRSCG، به ترتیب بر مبنای تعداد تکرار و تعداد فراخوانی‌های تابع/گرادیان نمایش داده شده است.



شکل ۱. نمودار عملکرد الگوریتم‌های HTSA، IMPBOT، L-BFGS، FRSCG بر مبنای تعداد تکرار



شکل ۲. نمودار عملکرد الگوریتم‌های HTSA، IMPBOT، L-BFGS، FRSCG بر مبنای تعداد فراخوانی‌های تابع/گرادیان

همان‌طور که در شکل‌های ۱ و ۲ نشان داده شده است، الگوریتم HTSA در بین سایر الگوریتم‌ها و برای مجموعه مسایل آزمون مورد استفاده بهترین می‌باشد؛ بنابراین، از نتایج عددی موثر بودن روش پیشنهادی نسبت به روش‌های IMPBOT، L-BFGS و FRSCG به طور واضح مشهود است.

۵ نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر روشی جدید با استفاده از ادغام استراتژی‌های ناحیه مطمئن و جستجوی خطی مبتنی بر ODE ارائه شد، روش پیشنهادی نه تنها از مزایای هر دو استراتژی ناحیه مطمئن و جستجوی خطی بهره می‌برد؛ بلکه با

توجه به نتایج موثر گزارش شده در خصوص فرمول بهروزرسانی SR1 از نمایش فشرده این فرمول در روش فوق استفاده شد تا برای مسایل مقیاس بزرگ به کار رود. نتایج به دست آمده موثر بودن روش پیشنهادی را نسبت به سایر الگوریتم‌ها در مجموعه مسایل آزمون مورد استفاده نشان داد. تحلیل همگرایی این روش در پژوهش‌های آتی مورد بحث قرار خواهد گرفت.

منابع

- [1] Shi, Z.J., Xu, Z.W., (2009). The convergence of subspace trust region methods. *J. Comput. Appl. Math.* 231, 365–377.
- [2] More, J., Garbow, B., Hillstom, K., (1981). Testing unconstrained optimization software. *ACM Trans. Math. Softw.* 7, 17–41.
- [3] Luo, X.L., Kelley, C.T., Liao, L.Z., Tam, H.W., (2009). Combining trust-region techniques and Rosenbrock methods to compute stationary points. *J. Optim. Theory Appl.* 140, 265–286.
- [4] Liu, D.C., Nocedal, J., (1989). On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Math. Program.* 45, 503–528.
- [5] Dolan, E.D., More, J., (2002). Benchmarking optimization software with performance profiles. *Math. Program., Ser. A* 91, 201–213.
- [6] Ortega, J. M., Rheinboldt, W.C., (1970). *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press, New York.
- [7] Andrei, N., Gradient flow algorithm for unconstrained optimization. ICI Technical Report (March 4, 2004). <http://csmo.ici.ro/neculai/anman.htm>.
- [8] Higham, D.J., (1999). Trust region algorithms and time step selection. *SIAM J. Numer. Anal.* 37, 194–210.
- [9] Raydan, M., (1997). The Barzilai and Borwein method for the large-scale unconstrained minimization problem. *SIAM J. Optim.* 7, 26–33.
- [10] Brown, A.A., Biggs, M.C., (1989). ODE versus SQP methods. *J. Optim. Theory Appl.* 62, 371–386.
- [11] Gertz, E.M., (2004). A quasi-Newton trust region method. *Math. Program., Ser. A* 100, 447–470.
- [12] Sun, J., Zhang, J.P., (2001). Global convergence of conjugate gradient methods without line search. *Ann. Oper. Res.* 103, 161–173.
- [13] Barzilai, J., Borwein, J.M. (1988). Two point step size gradient methods. *IMA J. Numer. Anal.* 8, 141–188.
- [14] Gill, P.E., Leonard, M.W., (2001). Reduced-Hessian quasi-Newton methods for unconstrained optimization. *SIAM J. Optim.* 12, 209–237.
- [15] J. Nocedal and S. J. Wright, (2006). *Numerical Optimization*, Springer.
- [16] Ou, Y.G., Zhou, Q., Lin, H.C., (2009). An ODE-based trust region method for unconstrained optimization problems. *J. Comput. Appl. Math.* 232, 318–326.
- [17] Erway, J.B., Marcia, R.F., (2017). On solving large-scale limited-memory quasi-Newton equations. *Linear Algeb. Appl.* 515, 196–225.
- [18] Snyman, J. A., (1982). A New and Dynamic Method for Unconstrained Optimization, *Appl. Math Model.*, 6, 449–462.
- [19] Nocedal, J., Yuan, Y.X., (1998). Combining trust region and line search techniques. *Adv. Non. Prog.* 53–175.
- [20] Modarres, F., Leong, W.J., (2014). Quasi-Newton methods based on ordinary differential equation approach for unconstrained nonlinear optimization. *Appl. Math. Comput.* 233, 272–291.
- [21] Ortega, J. M., Rheinboldt, W.C., (1970). *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*.
- [22] Andrei, N., (2008). An unconstrained optimization test functions collection. *Adv. Model. Optim.* 10(1), 147–161.
- [23] Han, L.X., (1993). On the convergence properties of an ODE algorithm for unconstrained optimization. *Math. Numer. Sin.* 15, 449–455.