УДК 519.85

В.О. СТОВБА, О.О. ЖМУД, О.І. КРИВОРУЧКО

ЕКСПЕРИМЕНТИ З СУБГРАДІЄНТНИМИ МЕТОДАМИ ПОЛЯКА ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СУМІСНИХ СЛАР

Описано два субградієнтні методи з кроком Поляка у вихідному та перетвореному просторах змінних. Наведено їх застосування для задачі розв'язання сумісних систем лінійних рівнянь за допомогою зведення її до задачі мінімізації опуклої функції з відомим її мінімальним значенням. Наведено результати обчислювальних експериментів для систем лінійних рівнянь, матриці яких мають розмірність 500×100 та утворюються з використанням генератора випадкових чисел на відрізках [0,3] та [3,10].

Вступ. Задача знаходження розв'язку сумісної системи лінійних рівнянь (СЛАР) може бути зведена до відшукання точки мінімуму опуклої функції при відомому її мінімальному значенні [1, 2]. При цьому опуклі функції можуть бути як гладкими, так і негладкими. Застосування субградієнтних методів мінімізації опуклих функцій дозволяє розроблювати «універсальні» алгоритми, тобто такі, що не залежать від того, є ранг матриці СЛАР повним чи неповним. Ці алгоритми можна застосовувати і для погано обумовлених гладких опуклих функцій.

У роботі [2] описані два субградієнтних методи, в тому числі з перетворенням простору, та проведено ряд експериментів з використанням описаних методів для мінімізації яружних опуклих функцій. У даній роботі проводяться експерименти для тієї ж задачі, але всі елементи матриць СЛАР утворюються з використанням генератора випадкових чисел на відрізках [0,3] та [3,10].

Стаття складається з трьох розділів. У першому розділі наведений загальний опис двох субградієнтних методів (А та Б) мінімізації опуклих функцій при відомому оптимальному значенні – субградієнтного методу з кроком Поляка у вихідному та перетвореному просторі змінних. Другий розділ містить постановку задачі та зведення її до задачі, яку розв'язують методи А та Б. У третьому розділі наведено опис тестових прикладів та результати обчислювальних експериментів для описаних методів.

1. Методи А та Б: субградієнтні методи Поляка. Розглядається задача

$$\min f(x),$$

при відомому її оптимальному значенні $f^* = f(x^*)$. Тут $f(x),\ x \in R^n$ – опукла функція, $g_f(x)$ – її субградієнт. Для знаходження точки $x_\varepsilon^* \in R^n$ такої, що $f(x_\varepsilon^*) \le f^* + \varepsilon$, можна використати субградієнтний метод Поляка (метод А) [2], представлений таким ітеративним алгоритмом.

Ініціалізація. Нехай f^* та $m \ge 1$ відомі. Виберемо початкову точку $x_0 \in R^n$, величину $\varepsilon > 0$ та перейдемо до наступної ітерації з величиною x_0.

Ітеративний процес. Нехай точка $x_k \in R^n$ була знайдена на *k*-й ітерації. Щоб перейти до наступної, *k*+1-ої ітерації, виконаємо такі дії.

*A*1. Обчислимо $f(x_k)$ та $g_f(x_k)$. Якщо $f(x_k) - f^* \le \varepsilon,$ тоді STOP $(k^* = k,\ x_\varepsilon^* = x_k).$

*A*2. Обчислимо наступну точку:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{g_f(x_k)}{\|g_f(x_k)\|},\ \ h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\|g_f(x_k)\|}.$$

*A*3. Перейдемо до *k*+1-ої ітерації з величиною x_{k+1}.

Теорема 1. Послідовність $\{x_k\}_{k=0}^{k^*-1}$, породжена методом А, задовольняє такі нерівності:

$$\|x_{k+1} - x^*\|^2 \le \|x_k - x^*\|^2 - \frac{m^2(f(x_k) - f^*)^2}{\|g_f(x_k)\|^2},\ k = 0,1,2,... \qquad (1)$$

Теорема 1 гарантує, що в субградієнтному методі Поляка відстань до точки мінімуму зменшується монотонно.

Для знаходження точки x_ε^* можна також використати субградієнтний метод Поляка в перетвореному просторі змінних [2] (визначений невиродженою матрицею B), який представлений такою ітеративною процедурою.

Ініціалізація. Маємо f^* та $m \ge 1$. Виберемо початкову точку $x_0 \in R^n$, невироджену $n \times n$-матрицю B і величину $\varepsilon > 0$. Перейдемо до наступної ітерації з величиною x_0.

Ітеративний процес. Нехай точка $x_k \in R^n$ була знайдена на *k*-й ітерації. Щоб перейти до наступної, *k*+1-ої ітерації, виконаємо такі дії.

*Б*1. Обчислимо $f(x_k)$ та $g_f(x_k)$. Якщо $f(x_k) - f^* \le \varepsilon$, тоді STOP $(k^* = k,\ x_\varepsilon^* = x_k)$.

*Б*2. Обчислимо наступну точку:

$$x_{k+1} = x_k - h_k \frac{B^T g_f(x_k)}{\left\| B^T g_f(x_k) \right\|},\ h_k = \frac{m(f(x_k) - f^*)}{\left\| B^T g_f(x_k) \right\|}.$$

*Б*3. Перейдемо до k+1-ої ітерації з величиною x_{k+1}.

Теорема 2. Послідовність $\{x_k\}_{k=0}^{k^*-1}$, породжена методом Б, задовольняє такі нерівності:

$$\left\| A(x_{k+1} - x^*) \right\|^2 \le \left\| A(x_k - x^*) \right\|^2 - \frac{m^2(f(x_k) - f^*)^2}{\left\| B^T g_f(x_k) \right\|^2},\ \ k = 0,1,2,... \tag{2}$$

Теорема 2 гарантує, що в субградієнтному методі з кроком Поляка в перетвореному просторі змінних відстань до точки мінімуму зменшується монотонно в перетвореному просторі.

2. Постановка задачі. Розглянемо сумісну систему лінійних рівнянь

$$Ax = b, \tag{3}$$

де A – дійсна матриця розмірності $n \times p$, $b \in R^p$ – вектор правих частин, $x \in R^n$ – вектор змінних, який необхідно знайти.

Множину розв'язків системи (3) позначимо X^*. Якщо $n = p$ та A – невироджена матриця розміром $n \times n$, то система (3) має єдиний розв'язок $x = A^{-1}b$, де A^{-1} – обернена до A матриця. У випадку, коли матриця A погано обумовлена, знаходження точки x^*, як правило, – досить складна задача.

Для зручності СЛАР (3) будемо розглядати в тотожному вигляді:

$$(a_i, x) = b_i,\ i = \overline{1, p}, \tag{4}$$

де $a_i \in R^n$ – вектор, отриманий транспонуванням i-го рядка матриці A.

Розглянемо три способи зведення задачі знаходження розв'язку СЛАР (3) до задачі знаходження мінімуму опуклої функції – гладкої або негладкої [3, 4]:

1) знайти точку мінімуму такої опуклої функції:

$$f_1(x) = \left\| Ax - b \right\|^2, \tag{5}$$

де $f_1(x)$ – гладка опукла квадратична функція для якої $f_1^* = 0$. Її субградієнт $g_{f_1(x)}$ обчислюється за формулою

$$g_{f_1(x)} = 2A^T(Ax - b); \tag{6}$$

2) знайти точку мінімуму такої опуклої функції:

$$f_2(x) = \sum_{i=1}^{p} \left| (a_i, x) - b_i \right|, \tag{7}$$

де $|\cdot|$ – модуль (абсолютна величина) числа. $f_2(x)$ – негладка опукла функція, для якої $f_2^* = 0$, а її субградієнт $g_{f_2(x)}$ обчислюється за формулою:

$$g_{f_2(x)} = \sum_{i=1}^{p} \delta_i a_i, \text{ де } \delta_i = \begin{cases} 1, \text{ якщо } (a_i, x) - b_i \geq 0 \\ -1, \text{ якщо } (a_i, x) - b_i < 0 \end{cases}; \tag{8}$$

3) знайти точку мінімуму такої опуклої функції:

$$f_3(x) = \max_{i=\overline{1,p}} \left| (a_i, x) - b_i \right|, \tag{9}$$

де $f_3(x)$ – теж негладка опукла функція, $f_3^* = 0$, а її субградієнт $g_{f_3(x)}$ обчислюється за формулою:

$$g_{f_3(x)} = \delta_{i^*} a_{i^*}, \text{ де } \delta_{i^*} = \begin{cases} 1, \text{ якщо } (a_i, x) - b_i \geq 0 \\ -1, \text{ якщо } (a_i, x) - b_i < 0 \end{cases}. \tag{10}$$

Тут i^* – індекс з $i \in \{1, ..., p\}$, при якому модуль лінійної функції $(a_i, x) - b_i$ досягає свого максимуму. У разі неоднозначності такого максимуму можна обрати довільний індекс, при якому він досягається.

Знаходження ε-розв’язків опуклих нерівностей (5), (7), (9) рівносильне рівності або достатньої близькості до нуля суми квадратів нев’язок, яку задає функція $f_1(x)$, суми модулів нев’язок, яку задає функція $f_2(x)$, та максимуму модулів нев’язок, що задається функцією $f_3(x)$. Ця близькість визначається параметром ε. Отже, задачу можна розв’язати, знайшовши точки мінімумів функцій $f_i(x), i = \overline{1,3}$ з точністю ε.

Якщо $X^* \neq \varnothing$, то точка мінімуму кожної з функцій $f_i(x), i = \overline{1,3}$ співпадає з розв’язком СЛАР (3), якщо вона єдина, або з одним із розв’язків, якщо система (3) має нескінченну кількість розв’язків. Залежно від вибору функції, ми отримаємо свій метод для знаходження розв’язку СЛАР. Назвемо ці методи за типом функції, тобто методу 1 відповідатиме функція $f_1(x)$, методу 2 – $f_2(x)$, і методу 3 – $f_3(x)$.

3. Обчислювальні експерименти. Будемо розв’язувати СЛАР (3) шляхом знаходження точок мінімуму опуклих функцій (5), (7) і (9). Вхідними даними є дві матриці A_1 та A_2 розмірністю 500×100, які утворюються з використанням генератора випадкових чисел з відрізка [0,3] (матриця A_1) та відрізка [3,10] (матриця A_2); вектор правих частин $b_i = \sum_{j=1}^{p} a_{ij}, i = 1,..,n$ та матриця перетворення простору $B = (b_{ij})_{i,j=1}^{p}$ з такими значеннями діагональних елементів: $b_{ii} = 0.64$, $i = \overline{1,3}$, $b_{44} = 0.67$, $b_{55} = 0.63$, $b_{ii} = 0.7$, $i = \overline{8,14}$, $b_{66} = b_{20\,20} = 0.7$, $b_{15\,15} = 0.99$, $b_{77} = b_{ii} = 1, i = \overline{16,19}$ та $i = \overline{21,100}$. Якщо матриця A має ранг 100, то функція має єдину точку мінімуму $x^* = (1,1,..,1)^T$.

Параметр ε визначає точність, з якою буде знаходитись ε-розв'язок по функції, а отже він матиме різний сенс залежно від вигляду функції. Наприклад, для функції $f_1(x)$ розв'язок являє собою точку, в якій сума квадратів нев'язок менша або рівна ε; для функції $f_2(x)$ – точку, в якій сума модулів нев'язок менша або рівна ε; нарешті для функції $f_3(x)$ – точку, в якій максимальний модуль нев'язки менший або рівний ε.

Скалярний параметр $m \geq 1$ в методах А та Б вводиться для того, щоб взяти до уваги спеціальні класи опуклих функцій. Наприклад, для кусково-лінійних негладких функцій параметр $m = 1$, а для квадратичних гладких $m = 2$. Зокрема, для функції $f_1(x)$ слід використовувати параметр $m = 2$, а для функцій $f_2(x)$ та $f_3(x)$ $m = 1$.

Результати роботи методів А та Б для матриці A_1 наведені в табл. 1 та 2, для матриці A_2 – в табл. 3 і 4. У першій колонці табл. 1 – 3 наведено значення параметра ε від 1.0e-02 до 1.0e-10. У колонках 2 – 3 та 6 – 7 табл. 1 – 3 наведено кількість ітерацій, необхідних для знаходження розв'язку з заданою точністю метода А та Б для функцій $f_1(x)$, $f_2(x)$ та $f_3(x)$ відповідно, у колонках 4 – 5 та 8 – 9 – відхилення отриманих розв'язків від оптимальних для тих же методів та функцій. Як початкова точка використовувалась $x_0 = (0, \dots 0)$.

ТАБЛИЦЯ 1. Кількість ітерацій методів А та Б для функції $f_1(x)$, відхилення отриманого розв'язку від оптимального

ε	A_1				A_2			
	itnA	itnB	$\lVert x_A^* - x^* \rVert$	$\lVert x_B^* - x^* \rVert$	itnA	itnB	$\lVert x_A^* - x^* \rVert$	$\lVert x_B^* - x^* \rVert$
10^{-2}	810	118	5.633e – 3	7.648e – 03	3034	140	2.437e – 03	3.308e – 03
10^{-4}	1612	178	6.030e – 4	7.203e – 04	5834	200	2.598e – 04	3.184e – 04
10^{-6}	2510	236	6.218e – 5	7.405e – 05	8940	258	2.670e – 05	3.333e – 05
10^{-8}	3452	294	6.302e – 6	7.649e – 06	12182	318	2.704e – 06	3.244e – 06
10^{-10}	4416	354	6.344e – 7	7.343e – 07	15494	378	2.724e – 07	3.172e – 07

З табл. 1 видно, що у випадку функції $f_1(x)$ для знаходження розв'язку методу А необхідно значно більше ітерацій проти методу Б. Наприклад, для досягнення точності 10^{-6} методу А необхідно 2510 ітерацій у випадку матриці A_1 та 8940 ітерацій у випадку матриці A_2. Водночас для досягнення тієї ж точності методу Б необхідно 236 та 258 ітерацій для матриць A_1 та A_2 відповідно.

ТАБЛИЦЯ 2. Кількість ітерацій методів А та Б для функції $f_2(x)$, відхилення отриманого розв'язку від оптимального

ε	A_1	A_2

	itnA	itnB	$\left\|x_A^* - x^*\right\|$	$\left\|x_B^* - x^*\right\|$	itnA	itnB	$\left\|x_A^* - x^*\right\|$	$\left\|x_B^* - x^*\right\|$
10^{-2}	51	80	2.96e – 05	3.626e – 05	60	92	1.321e – 05	1.387e – 05
10^{-4}	75	123	3.22e – 07	3.821e – 07	84	126	1.815e – 07	1.319e – 07
10^{-6}	103	163	4.40e – 09	3.425e – 09	119	161	1.439e – 09	1.449e – 09
10^{-8}	131	200	3.16e – 11	3.591e – 11	157	214	1.528e – 11	1.670e – 11
10^{-10}	159	240	3.92e – 13	3.936e – 13	275	626	1.476e – 13	2.013e – 13

У випадку функції $f_2(x)$ (табл. 2) спостерігається дещо інша ситуація: методу Б необхідно більше ітерацій ніж методу А, при цьому ця кількість зростає зі збільшенням точності, а також при переході від матриці A_1 до A_2. Наприклад, для досягнення точності 10^{-8} для матриці A_1 метод Б потребує 200 ітерацій проти 131 у методу А; для матриці A_2 ця кількість зростає до 214 ітерацій у методу Б та 157 ітерацій у методу А.

ТАБЛИЦЯ 3. Кількість ітерацій методів А та Б для функції $f_3(x)$, відхилення отриманого розв'язку від оптимального

ε	A_1				A_2			
	itnA	itnB	$\left\|x_A^* - x^*\right\|$	$\left\|x_B^* - x^*\right\|$	itnA	itnB	$\left\|x_A^* - x^*\right\|$	$\left\|x_B^* - x^*\right\|$
10^{-2}	665	1103	5.33e – 03	5.39e – 03	1707	3815	2.287e – 03	2.33e – 03
10^{-4}	1427	2229	5.67e – 05	5.96e – 05	3962	7043	2.448e – 05	2.40e – 05
10^{-6}	2262	3425	5.65e – 07	6.00e – 07	6426	10327	2.513e – 07	2.52e – 07
10^{-8}	3098	4631	6.02e – 09	6.02e – 09	9074	13723	2.621e – 09	2.50e – 09
10^{-10}	3977	5843	5.69e – 11	5.88e – 11	11816	17102	2.637e – 11	2.54e – 11

Для функції $f_3(x)$ методи показують найбільшу кількість ітерацій: для досягнення точності 10^{-8} у випадку матриці A_1 методу Б необхідно виконати 4631 ітерацій, методу А – 3098. Таке зростання кількості ітерацій для функцій $f_2(x)$ та $f_3(x)$ пояснюється вибором матриці перетворення простору B: оскільки всі три функції $f_i(x),\ i=\overline{1,3}$ визначають розв'язок по-різному, один і той же вид матриці B може як суттєво прискорювати метод Б для однієї функції, так і значно вповільнювати його для іншої.

Висновки. Субградієнтний метод з кроком Поляка та його модифікацію з перетворенням простору можна успішно використовувати для розв'язання систем лінійних рівнянь незалежно від того, є ранг матриці системи повним чи неповним. При зменшенні рангу спостерігається підвищення ефективності роботи описаних алгоритмів – дослідження в цьому напрямку проводяться. Також ефективність зростає при виборі матриці перетворення простору таким чином, щоб зменшити ступінь яружності функції, яка мінімізується. Описане в статті формулювання задач дозволяє успішно застосовувати субградієнтні методи та їх модифікації для розв'язання сумісних СЛАР.

Робота виконана за фінансової підтримки НАН України (проект № 0118U005227) та Volkswagen Foundation (грант No 90 306 – перший автор).

В.А. Стовба, А.А. Жмуд, Е.И. Криворучко

ЭКСПЕРИМЕНТЫ С СУБГРАДИЕНТНЫМИ МЕТОДАМИ ПОЛЯКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СОВМЕСНЫХ СЛАУ

Описаны два субградиентные методы с шагом Поляка в исходном и преобразованном пространствах переменных. Приведено их использование для задачи решения совместных систем линейных уравнений с помощью сведения ее к задаче минимизации выпуклой функции с известным её минимальным значением. Приведены результаты вычислительных экспериментов для систем линейных уравнений, матрицы которых имеют размерность 500×100 и образуются с использованием генератора случайных чисел на отрезках [0,3] и [3,10].

V.O. Stovba, O.O. Zhmud, O.I. Kryvoruchko

EXPERIMENTS WITH POLYAK'S SUBGRADIENT METHODS FOR SOLVING SYSTEMS OF LINEAR EQUATIONS

Described are two subgradient methods with Polyak's step in the original and transformed space of variables. Given are their applications for solving systems of linear equations by means of reducing it to convex function minimization problem with its minimal value known. Given are the results of computational experiments for linear equation systems, matrices of which are 500×100 dimension matrices and generated using random numbers generator from the ranges [0,3] and [3,10].

Список літератури

1. Стецюк П.И. Ускорение субградиентного метода Поляка. *Теорія оптимальних рішень*. К.: Ін-т кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. 2012. № 11. С. 151 – 60.
2. Поляк Б.Т. Минимизация негладких функционалов. *Журнал вычислительной математики и математической физики.* 1969. **9**, № 3. С. 509 – 521.
3. Stetsyuk P., Stovba V., Chernousova Z. Subgradient Method with Polyak's Step in Transformed Space. Optimization and Applications. OPTIMA 2018. Communications in Computer and Information Science. Springer. 2019. Vol. 974. P. 49 – 63.
4. Стецюк П.И. К методам решения плохообусловленных систем линейных уравнений. *Теорія оптимальних рішень*. К.: Ін-т кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. 2001. С. 9 – 15.
5. Стецюк П.И. Методы эллипсоидов и *r*-алгоритмы. Кишинэу. Эврика, 2014. 488 с.

Одержано 18.03.2019