Aceleración del método de Barzilai-Borwein

Edgar Osvaldo López Zúñiga Giovanni Gamaliel López Padilla

31 de mayo de 2022

Método Barzilai-Borwein

El estudio de la solución de la optmización de una función cuadratica de la forma

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x \tag{1}$$

donde $b \in \mathbb{R}^n$ y A es una matriz definida positiva en $\mathbb{R}^{n \times n}$ resulta ser una base importante a la hora de resolver problemas más complejos. El resolver este problema equivalente a encontrar la solución del sistema de ecuaciones

$$Ax = b$$

La elección de los tamaños de paso propuestos estan basados en métodos Cuasi-Newton. Donde α_k es remplazada por la matriz D_k tal que

$$D_k = \alpha_k I \tag{2}$$

Método Barzilai-Borwein

El tamaño de paso es calculado a partir de la optimización de D_k^{-1} (BB1) y D_k (BB2) tal que satisfagan la ecuación de la secante desde un punto de vista de mínimos cuadrados (ecuación 3).

$$\min_{D=\alpha I} ||D^{-1}s_{k-1} - y_{k-1}|| \qquad \min_{D=\alpha I} ||s_{k-1} - Dy_{k-1}||$$
(3)

donde

$$s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$$
 $y_{k-1} = g_k - g_{k-1}$

Método Barzilai-Borwein

Las soluciones del problema son las descritas en la ecuación 4.

$$\alpha_k^{BB1} = \frac{s_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \qquad \alpha_k^{BB2} = \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T y_{k-1}} \tag{4}$$

Al considerar la desigualdad de Cauchy-Schwarz observa que cuando $s_{k-1}^Ty_{k-1}$ es mayor a cero, se cumple que $\alpha_k^{BB1} \geq \alpha_k^{BB2}$. Debido a esto se suele llamar a α_k^{BB1} tamaño de paso largo de Barzilai-Borwein y paso corto a α_k^{BB2} .

Método Barzilai-Borwein

Considérese el problema de acelerar los métodos de descenso de gradiente que generan secuencias de iterados de la forma

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k$$

para resolver el problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

donde $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ es continuamente diferenciable, $g_k = \nabla f(x_k)$ y $\alpha_k > 0$ es el tamaño de paso sobre la dirección del gradiente.

Método Barzilai-Borwein

En particular se considerará una función cuadrática de la forma 1 utilizando el tamaño de paso mostrado en la ecuación 5.

$$\alpha_k(\Psi(A)) = \frac{g_{k-1}^T \Psi(A) g_{k-1}}{g_{k-1}^T \Psi(A) A g_{k-1}}$$
(5)

Donde $\Psi(\cdot)$ es una función real analítica en $[\lambda_1,\lambda_n]$ que se puede expresar como una serie de Laurent (ecuación 6).

$$\Psi(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k z^k, \ c_k \in \mathbb{R}^n \ \text{ tal que } \ 0 < \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k z^k < +\infty \forall z \in [\lambda_1, \lambda_n]$$
 (6)

Tamaño de paso

Se explotaron algunas propiedades ortogonales en este subespacio bidimensional para acelerar los métodos.

Es por ello que si se quiere acelerar la convergencia de los métodos con tamaño de paso α_k (ecuación 5) en un subespacio de menor dimensionalidad se deben mantener propiedades ortogonales. Suponiendo que para un k>0, existe un q_k que satisface

$$(I - \alpha_{k-1}A)q_k = g_{k-1}$$

Tamaño de paso

Con esto, se tiene el lema 1 que presenta una propiedad para la derivación del tamaño de paso.

Lema

Suponiendo que la secuencia $\{g_k\}$ se obtiene aplicando un método de gradiente con pasos como el paso general (α_k) para minimizar una función cuadrática y q_k satisface que $(I-\alpha_{k-1}A)q_k=g_{k-1}$. Entonces

$$q_k^T \Psi(A) g_{k+1} = 0.$$

Tamaño de paso

Para probar el lema 1 se tiene que:

$$\begin{split} q_k^T \Psi(A) g_{k+1} &= q_k^T \Psi(A) (I - \alpha_k A) (I - \alpha_{k-1} A) g_{k-1} \\ &= q_k^T (I - \alpha_k A) \Psi(A) (I - \alpha_{k-1} A) g_{k-1} \\ &= g_{k-1}^T \Psi(A) (I - \alpha_k A) g_{k-1} \\ &= g_{k-1}^T \Psi(A) g_{k-1} - \alpha_k g_{k-1}^T \Psi(A) A g_{k-1} \\ &= g_{k-1}^T \Psi(A) g_{k-1} \left[\frac{g_{k-1}^T \Psi(A) g_{k-1}}{g_{k-1}^T \Psi(A) A g_{k-1}} - \alpha_k \right] \\ &= 0 \end{split}$$

Tamaño de paso

Considerando el problema de minimizar una función f en un subespacio bidimensional generado por

$$u = \frac{\Psi^r(A)q_{k-1}}{|\Psi^r(A)q_{k-1}|} \qquad v = \frac{\Psi^r(A)g_k}{|\Psi^r(A)g_k|}$$
 (7)

donde u y v forman una base ortogonal para \mathbb{R}^2 . Defindiendo una función ϕ como

$$\phi(t,l) := f\left(x_k + t \frac{\Psi^r(A)q_{k-1}}{\|\Psi^r(A)q_{k-1}\|} + l \frac{\Psi^r(A)g_k}{\|\Psi^r(A)g_k\|}\right)$$
(8)

Tamaño de paso

al expandir en una serie de Taylor obtenemos que

$$\phi(t,l) = f(x_k) + \nabla^T f(x_k) [tu + lv] + \frac{1}{2} [tu + lv]^T \nabla^2 f(x_k) [tu + lv]$$
(9)

Tomando a una matriz B_k como en la ecuación 10.

$$B_k = (u, v)^T \tag{10}$$

Con las ecuaciones 7 y 10 podemos escribir la ecuación 9 como en la ecuación 11.

$$\phi(t,l) = f(x_k) + g_k^T B_k^T \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix}^T B_k A B_k^T \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix}$$
 (11)

Tamaño de paso

Se define el vector ϑ como

$$\vartheta_k = B_k g_k = \begin{pmatrix} \frac{g_k^T \Psi^r(A) q_{k-1}}{|\Psi^r(A) q_{k-1}|} \\ \frac{g_k^T \Psi^{1-r}(A) g_k}{|\Psi^{1-r}(A) g_k|} \end{pmatrix}$$
(12)

y a la matriz H_k como

$$H_{k} = B_{k}AB_{k}^{T} = \begin{pmatrix} \frac{q_{k-1}^{T}\Psi^{2r}(A)Aq_{k-1}}{\|\Psi^{r}(A)q_{k-1}\|^{2}} & \frac{q_{k-1}^{T}\Psi^{r}(A)Ag_{k}}{\|\Psi^{r}(A)q_{k-1}\|\Psi^{1-r}(A)g_{k}\|} \\ \frac{q_{k-1}^{T}\Psi^{r}(A)Ag_{k}}{\|\Psi^{r}(A)q_{k-1}\|\Psi^{1-r}(A)g_{k}\|} & \frac{g_{k}^{T}\Psi^{2(1-r)}(A)Ag_{k}}{\|\Psi^{r}(A)g_{k}\|^{2}} \end{pmatrix}$$

$$(13)$$

Tamaño de paso

Es posible expresar la función $\phi(t,l)$ como en la ecuación 14.

$$\phi(t,l) = f(x_k) + \vartheta_k^T \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix}^T H_k \begin{pmatrix} t \\ l \end{pmatrix}$$
(14)

Denotando las componentes de H_k por H_k^{ij} , i,j=1,2 y notando que $B_kB_k^T=I$ se tiene el teorema 1.

Tamaño de paso

Teorema (Terminación finita)

Suponga que un método de gradiente se aplica para minimizar una función cuadrática bidimensional con α_k dado por el paso general mencionado anteriormente para todas las $k \neq k_0$ y usa el tamaño de paso

$$\tilde{\alpha}_{k_0} = \frac{2}{\left(H_{k_0}^{(11)} + H_{k_0}^{(22)}\right) + \sqrt{\left(H_{k_0}^{(11)} - H_{k_0}^{(22)}\right)^2 + 4\left(H_{k_0}^{(12)}\right)^2}}$$

en la iteración k_0 -ésima donde $k_0 \ge 2$. Entonces, el método encontrará el minimizador en máximo $k_0 + 3$ iteraciones.

Tamaño de paso

Para demostrar el teorema 1 se supone que x_k no es un minimizador para toda $k=1,...,k_0+2$. Para simplificar durante la prueba, se utilizará comom notación k para referirse a k_0 .

Es necesario observar que $\tilde{\alpha_k}$ satisface la ecuación 15.

$$\tilde{\alpha}_k^2 \Delta - \tilde{\alpha}_k \left(H_k^{(11)} + H_k^{(22)} \right) + 1 = 0 \tag{15}$$

en donde $\Delta = \det(H_k) = \det(A) > 0$.

Tamaño de paso

Sea

$$\Theta = \left(H_k^{(12)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(22)} \vartheta_k^{(2)}\right) \vartheta_k^{(1)} - \left(H_k^{(11)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(12)} \vartheta_k^{(2)}\right) \vartheta_k^{(2)}$$

en donde $\vartheta_k^{(i)}$ son las componentes de ϑ_k . Multiplicando Θ a la ecuación 15 se tiene lo siguiente

$$\tilde{\alpha}_k^2 \Delta \Theta - \tilde{\alpha_k} \left(H_k^{(11)} + H_k^{(12)} \right) \Theta + \Theta = 0,$$

que exactamente es

$$ab = cd$$

donde

$$a = H_k^{(22)} v_k^1 - H_k^{(12)} v_k^{(2)} - \tilde{\alpha}_k \Delta \vartheta_k^{(1)} \qquad b = \vartheta_k^{(2)} - \tilde{\alpha}_k (H_k^{(12)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(22)} \vartheta_k^{(2)})$$

$$c = H_k^{(11)} v_k^2 - H_k^{(12)} v_k^{(1)} - \tilde{\alpha}_k \Delta \vartheta_k^{(1)} \qquad d = \vartheta_k^{(1)} - \tilde{\alpha}_k (H_k^{(11)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(12)} \vartheta_k^{(2)}).$$

Tamaño de paso

Consideremos dos vectores $\mathbf{A} = (a_1, a_2)^T$ y $\mathbf{B} = (b_1, b_2)^T$, tales que se cumple $a_1b_2 = a_2b_1$. Sustituyendo b_2 en \mathbf{B} , tenemos lo siguiente

$$m{B} = egin{pmatrix} b_1 \ rac{b_1 a_2}{a_1} \end{pmatrix} = rac{b_1}{a_1} m{A}$$

por los que podemos decir que B es paralelo a A.

Tamaño de paso

Haciendo uso del resultado anterior podemos decir que el vector

$$\begin{pmatrix} H_k^{(22)} \vartheta_k^{(1)} - H_k^{(12)} \vartheta_k^{(2)} - \tilde{\alpha}_k \Delta \vartheta_k^{(1)} \\ H_k^{(11)} \vartheta_k^{(2)} - H_k^{(12)} \vartheta_k^{(1)} - \tilde{\alpha}_k \Delta \vartheta_k^{(2)} \end{pmatrix}$$

es paralelo a

$$\begin{pmatrix} v_k^{(1)} - \tilde{\alpha}_k (H_k^{(11)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(12)} \vartheta_k^{(2)}) \\ v_k^{(2)} - \tilde{\alpha}_k (H_k^{(12)} \vartheta_k^{(1)} + H_k^{(22)} \vartheta_k^{(2)}) \end{pmatrix}$$

Tamaño de paso

Por ende el vector $\vartheta_k+H_k(-\tilde{\alpha}_k\vartheta_k)$ es paralelo a $H_k^{-1}\vartheta_j-\tilde{\alpha}_k\vartheta_k$. Es decir

$$\vartheta_k + H_k(-\tilde{\alpha}_k \vartheta_k) = \gamma (H_k^{-1} \vartheta_j - \tilde{\alpha}_k \vartheta_k)$$
(16)

donde $\gamma \neq 0 \in \mathbb{R}$. Si multiplicamos por la derecha a la ecuación 16 por B_k^T se tiene que

$$B_k^T[\vartheta_k + H_k(-\tilde{\alpha}_k\vartheta_k)] = \gamma B_k^T(H_k^{-1}\vartheta_j - \tilde{\alpha}_k\vartheta_k).$$

Tamaño de paso

Se sabe que $B_k^TB_k=I$, $\vartheta_k=B_kg_k$ y que $H_k=B_kAB_k^T$. Además $g_{k+1}=g_k+\tilde{\alpha}_kAg_k$. Haciendo uso de este conocimiento, se obtiene que

$$g_k + A(-\tilde{\alpha}_k B_k^T \vartheta_k) = \gamma(B_k^T H_k^{-1} \vartheta_k + \tilde{\alpha}_k g_k)$$

$$g_k + A(-\tilde{\alpha}_k g_k) = \gamma(B_k^T H_k^{-1} \vartheta_k + \tilde{\alpha}_k g_k)$$

$$g_{k+1} = \gamma(B_k^T H_k^{-1} \vartheta_k + \tilde{\alpha}_k g_k)$$

$$g_{k+1} = \gamma(B_k^T B_k A^{-1} B_k^T \vartheta_k + \tilde{\alpha}_k g_k)$$

$$g_{k+1} = \gamma(A^{-1} g_k + \tilde{\alpha}_k g_k)$$

Tamaño de paso

Factorizando A^{-1} se tiene

$$g_{k+1} = \gamma A^{-1} (g_k + \tilde{\alpha}_k A g_k)$$

Considerando que $g_{k+1}=g_k+ ilde{lpha}_kAg_k$ llegamos a

$$g_{k+1} = \gamma A^{-1} g_{k+1}$$

Es decir g_{k+1} es un eigenvector de la matriz A.

Tamaño de paso

Por hipótesis, sabemos que x_{k+2} no es un minimizador, así que $g_{k+2} \neq 0$ y el algoritmo no se detendrá en la k+2-ésima iteración. Entonces, calculando α_{k+2} como

$$\alpha_{k+2} = \frac{g_{k+1}^T \Psi(A) g_{k+1}}{g_{k+1}^T \Psi(A) A g_{k+1}} = 1/\lambda$$

tenemos que

$$g_{k+3} = (I - \alpha_{k+2}A)g_{k+2}$$

= $(1 - \alpha_{k+2}\lambda)g_{k+2} = 0$

lo que implica que x_{k+3} debe ser el minimizador. Si tomamos $k_0=2$ en el teorema, el tamaño de paso encontrará al minimizador exacto en máximo 5 iteraciones cuando se tiene una función cuadrática bidimensional fuertemente convexa.

Tamaño de paso

Corollary

Suponga que un método de gradiente se aplica a una función cuadrática bidimensional con α_{k_0+m} para $k_0\geq 2$, algún entero positivo m y con $\alpha_{k_0+m}=\tilde{\alpha_{k_0}}$ para toda $k\neq k_0+m$. Entonces, el método se detendrá en máximo k+m+3 iteraciones.

Tamaño de paso

Si hacemos $\Psi(A)=I$, $\Psi(A)=A$ y r=1/2 en la ecuación 5 y tomando $k_0=k$ se puede derivar los siguientes tamaños de paso:

$$\tilde{\alpha}_{k}^{BB1} = \frac{2}{\frac{q_{k-1}^{T} A q_{k-1}}{\|q_{k-1}\|^{2}} + \frac{1}{\alpha_{k}^{SD}} + \sqrt{\left(\frac{q_{k-1}^{T} A q_{k-1}}{\|q_{k-1}\|^{2}} - \frac{1}{\alpha_{k}^{SD}}\right)^{2} + \frac{4(q_{k}^{T} A g_{k})^{2}}{\|q_{k-1}\|^{2}\|g_{k}\|^{2}}}$$
(17)

$$\tilde{\alpha}_{k}^{BB2} = \frac{2}{\frac{1}{\hat{\alpha}_{k-1}} + \frac{1}{\alpha_{k}^{MG}} + \sqrt{\left(\frac{1}{\hat{\alpha}_{k-1}} + -\frac{1}{\alpha_{k}^{MG}}\right)^{2} + \Gamma_{k}}}$$
(18)

Tamaño de paso

en donde

$$\hat{\alpha}_k = \frac{q_k^T A q_k}{q_k^T A^2 q_k} \text{ y } \Gamma_k = \frac{4 \left(q_{k-1} A^2 g_k \right)^2}{q_{k-1}^T A q_{k-1} g_k^T A g_k} \tag{19}$$

Ahora, de 17 y 18 se tiene

$$\tilde{\alpha}_{k}^{BB1} \le \min \left\{ \alpha_{k}^{SD}, \frac{\|q_{k-1}\|^{2}}{q_{k-1}^{T} A q_{k-1}} \right\} \text{ y } \tilde{\alpha}_{k}^{BB2} \le \min \left\{ \alpha_{k}^{MG}, \hat{\alpha}_{k-1} \right\}$$
 (20)

Tamaño de paso

El método de gradiente no-monónotono adaptativo (ANGM) toma el paso largo de BB $lpha_k^{BB1}$ cuando $lpha_k^{BB2}/lpha_k^{BB1} \ge au_1$ para algún $au_1 \in (0,1)$. De otra manera, toma un tamaño de paso $lpha_k^{BB2}$ o \tilde{lpha}_k^{BB2} dependiendo del cociente $\|g_{k-1}\|/\|g_k\|$. El paso $lpha_k^{BB2}$ minimiza al gradiente tal que

$$\alpha_k^{BB2} = \alpha_{k-1}^{MG} = \arg\min_{\alpha \in \mathbb{R}} ||g_{k-1} - \alpha A g_{k-1}||.$$

ANGM

El ANGM utiliza el tamaño de paso monótono $\tilde{\alpha}_k^{BB2}$ cuando $\|g_{k-1}\| > \tau_2 \|g_k\|$, de otra manera se deberían tomar ciertos pasos BB2. El ANGM aplica las siguientes estrategias adaptativas para elegir el tamaño de paso:

$$\alpha_k = \begin{cases} \min\{\alpha_k^{BB2}, \alpha_{k-1}^{BB2}\}, \text{ si } \alpha_k^{BB2} < \tau_1 \alpha_k^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| < \tau_2 \|g_k\| \\ \tilde{\alpha}_k^{BB2}, \text{ si } \alpha_k^{BB2} < \tau_1 \alpha_k^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| \ge \|g_k\| \\ \alpha_k^{BB1}, \text{ de otro modo} \end{cases}$$
 (21)

ANGR1

Se ha encontrado que los métodos de gradiente que utilizan pasos retardados pueden llevar a mejores desempeños, así reemplazando $\tilde{\alpha}_k^{BB2}$ en 21 por $\tilde{\alpha}_{k-1}^{BB2}$ se obtiene una variante llamada ANGR1:

$$\alpha_k = \begin{cases} \min\{\alpha_k^{BB2}, \alpha_{k-1}^{BB2}\}, & \text{si } \alpha_k^{BB2} < \tau_1 \alpha_k^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| < \tau_2 \|g_k\| \\ \tilde{\alpha}_{k-1}^{BB2}, & \text{si } \alpha_k^{BB2} < \tau_1 \alpha_k^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| \ge \|g_k\| \\ \alpha_k^{BB1}, & \text{de otro modo} \end{cases}$$
 (22)

ANGR2

Ahora, para simplificar el ANGR1 se puede remplazar $\tilde{\alpha}_{k-1}^{BB2}$ por su cota superior, es decir, se puede hacer uso de:

$$\alpha_{k-1}^{BB2} \le \min\left\{\alpha_k^{BB2}, \hat{\alpha}_{k-2}\right\}$$

Como resultado de esto, se obtiene otra variante de ANGM a la que se llama ANGR2:

$$\alpha_{k} \begin{cases} \min\{\alpha_{k}^{BB2}, \alpha_{k-1}^{BB2}\}, \text{ si } \alpha_{k}^{BB2} < \tau_{1}\alpha_{k}^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| < \tau_{2}\|g_{k}\| \\ \min\{\alpha_{k}^{BB2}, \hat{\alpha}_{k-2}\}, \text{ si } \alpha_{k}^{BB2} < \tau_{1}\alpha_{k}^{BB1} \text{ y } \|g_{k-1}\| \ge \|g_{k}\| \\ \alpha_{k}^{BB1}, \text{ de otro modo} \end{cases}$$
 (23)

ANGM, ANGR1 y ANGR2

Es necesario notar que para la implementación de los métodos ANGM, ANGR1 y ANGR2 no es necesario calcular productos de matriz-vector.

$$\hat{\alpha}_k = \frac{q_k^T A q_k}{q_k^T A^2 q_k} = \frac{\alpha_{k-1} q_k^T (q_k - g_{k-1})}{(q_k - g_{k-1})^T (q_k - g_{k-1})}$$
(24)

ANGM, ANGR1 y ANGR2

Debido a que el cálculo de Ag_k se necesita para el término g_{k+1} y Γ_k en $\tilde{\alpha}_k^{BB2}$. Para $\tilde{\alpha}_{k-1}^{BB2}$, se necesita el calculo del término

$$g_{k-1}^T A^2 q_{k-2} = \frac{1}{\alpha_{k-3}} (q_{k-2} - g_{k-3})^T A g_{k-1} \qquad A g_{k-1} = \frac{1}{\alpha_{k-1}} (g_{k-1} - g_k)$$

por ende

$$\Gamma_{k-1} = \frac{4((q_{k-2} - g_{k-3})^T (g_{k-1} - g_k))^2}{\alpha_{k-3}\alpha_{k-1}((q_{k-2} - g_{k-3})^T q_{k-2})g_{k-1}^T (g_{k-1} - g_k)}$$

por lo que no se requiere calcular productir de matriz-vector adicionales para Γ_{k-1} en $\tilde{\alpha}_{k1}^{BB2}$.

ANGM, ANGR1 y ANGR2

Un problema a tener en cuenta es que el cálculo de q_k de forma exacta como se define en 6 puede llegar a ser tan difícil como minimizar la función cuadrática. Es por esto que a la hora de implementar, se puede utilizar una aproximación de q_k notando que satisface la ecuación

$$q_k^T g_k = \|g_{k-1}\|^2 \tag{25}$$

ANGM, ANGR1 y ANGR2

Una forma eficiente de encontrar la q_k que satisface la ecuación de secante 25 es tratando a la matriz Hessiana A como una matriz diagonal, y así derivar q_k de $g_{k+1}^{(j)} = (1 - \alpha_k \lambda_j) g_k^{(j)}$ cuando $g_k^{(j)} \neq 0$,

$$q_k^{(i)} = \frac{g_{k-1}^{(i)}}{1 - \alpha_{k-1}\lambda_i} = \frac{(g_{k-1}^{(i)})^2}{g_k^{(i)}}, \ i = 1, ..., n$$
 (26)

y en el caso de que $g_k^{(i)}=0$ se hace $q_k^{(i)}=0$.

Resultados

Función de Rosembrock

La función de Rosembrock se define en la ecuación 27.

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} 100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)$$
 (27)

Función Wood

La función de Wood se define en la ecuación 28.

$$f(x) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2 + (x_3 - 1)^2 + 90(x_3 - x_4)^2 + 10, 1((x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2) + 19, 8(x_2 - 1)(x_4 - 1)$$
(28)

Función Lambda

En el artículo de Yakui Huang se utiliza una función definida de la siguiente manera:

$$f(x) = rac{1}{2}x^TAx$$
 $A = egin{cases} 0 & \mathsf{para}\ i
eq 0 \ 10^{rac{ncond}{n-1}(n-j)} & \mathsf{para}\ i = j \end{cases}$

donde $ncond = log\kappa \cos \kappa = 10^3$ y n = 10.

Función cuadrática

En el mismo artículo⁴ se propone una función cuadrática donde la matriz esta definida de la siguiente manera:

$$A=diag\{1,\lambda\}$$

En nuestro caso tomamos $\lambda = 10$.

Porcentaje de contribución

Se definió una función γ para medir el porcentaje de las dos componentes más grandes del gradiente en cada iteración de la optimización. La función γ tiene la siguiente forma

$$\gamma(g_k) = \frac{|g_k^{(1)}| + |g_k^{(2)}|}{\sum_i |g_k^{(i)}|}$$

Realizando el calculo de la función γ con la función lambda en el punto inicial $x=(10,10,\dots,10)^T$ se obtuvieron los resultados mostrados en la figura 1 para los diferentes métodos.

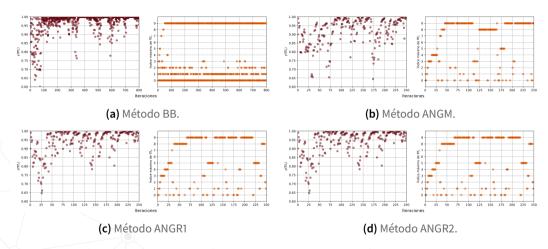


Figura 1: Función γ para diferentes métodos (izquierda) y la posición en el vector de la componente más grande (derecha).

Porcentaje de contribución

| Método | $\gamma(g_k)>0.8$ | Total |
|--------|-------------------|-------|
| SD | 8057 | 8104 |
| BB | 815 | 851 |
| ANGM | 293 | 316 |
| ANGR1 | 240 | 253 |
| ANGR2 | 200 | 245 |

Tabla 1: Número de iteraciones donde el valor de la función γ tuvó un valor mayor a 0.8 para cada método de optimización.

Estabilidad de resultados

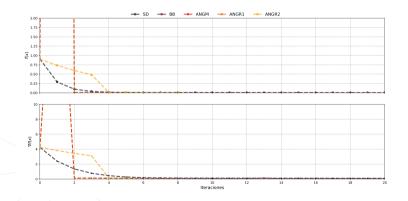


Figura 2: Valor de la función y norma del gradiente en cada iteración de la mejor ejecución de cada método de optimización de la función cuadrática con matriz diagonal.

Estabilidad de resultados

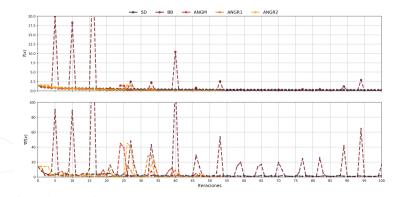


Figura 3: Valor de la función y norma del gradiente en cada iteración de la mejor ejecución de cada método de optimización de la función de Rosembrock con matriz diagonal.

| Función | Valor | SD | ВВ | ANGM | ANGR1 | ANGR2 |
|------------|-------------|----------|---------|--------|--------|--------|
| Lambda | Función | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 7764.81 | 2770.34 | 252.43 | 289.49 | 255.83 |
| Cuadrática | Función | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 713.00 | 1531.23 | 5.24 | 7.36 | 9.70 |
| Rosembrock | Función | 4.16 | 42.25 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 0.57 | 45.45 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 10000.00 | 1603.21 | 68.84 | 70.17 | 67.15 |
| Wood | Función | 0.00 | 3.16 | 5.07 | 4.56 | 8.43 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 9428.69 | 1806.43 | 360.36 | 292.43 | 199.21 |

Tabla 2: Media de las 100 ejecucciones partiendo de puntos aleatorios.

| Función | Valor | SD | ВВ | ANGM | ANGR1 | ANGR2 |
|------------|-------------|--------|---------|--------|--------|--------|
| Lambda | Función | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 612.38 | 209.34 | 32.55 | 28.34 | 25.04 |
| Cuadrática | Función | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 43.81 | 96.11 | 1.19 | 1.85 | 2.88 |
| Rosembrock | Función | 14.24 | 393.58 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Gradiente | 1.36 | 396.05 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 0.00 | 1867.61 | 17.32 | 20.59 | 14.92 |
| Wood | Función | 0.00 | 10.09 | 12.22 | 11.86 | 14.40 |
| | Gradiente | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| | Iteraciones | 465.60 | 633.53 | 190.56 | 204.76 | 119.76 |

Tabla 3: Desviaciones estandar de las 100 ejecucciones partiendo de puntos aleatorios.

Conclusiones

References I

J. Barzilai and J. M. Borwein.

Two-Point Step Size Gradient Methods.

IMA Journal of Numerical Analysis, 8(1):141–148, 01 1988.

Y.-H. Dai and R. Fletcher.

Projected barzilai-borwein methods for large-scale box-constrained quadratic programming.

Numerische Mathematik, 100(1):21–47, 2005.

R. Fletcher.

On the barzilai-borwein method.

In Optimization and control with applications, pages 235–256. Springer, 2005.

References II

Y. Huang, Y.-H. Dai, X.-W. Liu, and H. Zhang.

On the acceleration of the barzilai-borwein method.

Computational Optimization and Applications, pages 1–24, 2022.

Y. Huang, Y.-H. Dai, X.-W. Liu, and H. Zhang.

On the asymptotic convergence and acceleration of gradient methods.

Journal of Scientific Computing, 90(1):1–29, 2022.

B. Oleg.

Stabilized barzilai-borwein method.

JCM, 37(6):916–936, jun 2019.

References III

M. Raydan.

On the barzilai and borwein choice of steplength for the gradient method.

IMA Journal of Numerical Analysis, 13(3):321–326, 1993.

M. Raydan.

The barzilai and borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem.

SIAM Journal on Optimization, 7(1):26–33, 1997.