العـــــدد 19A تشر2ين 2025
No.19A Nov. 2025
المجلة العراقية للبحوث الإنسانية والإجتماعية والعلمية
Iraqi Journal of Humanitarian, Social and Scientific Research
Print ISSN 2710-0952 Electronic ISSN 2790-1254

Improvement of three term conjugate gradient algorithm in unconstrained optimization

Abeer Abdulkhaleq Ahmad[1], Huda I. Ahmad[2]
Department of Mathematics, College of Computer Science and Mathematics, University of Mosul, Mosul, Iraq
Department of Operations Research and Intelligence Techniques, College of Computer Sciences and Mathematics, University of Mosul, Iraq,
abeeraldabagh@uomosul.edu.iq, dr.hudaea@uomosul.edu.iq

Abstract:

This paper proposes a new three-term conjugate gradient (CG)algorithm for solving unconstrained optimization problems efficiently. The proposed method generates search directions that satisfy the sufficient descent condition and ensure global convergence under standard assumption of nonlinear CG methods. A third corrective term is incorporated into the conjugate gradient formula to enhance numerical stability in large-scale problems. This term reduces the accumulation of round–off errors during numerous iterations and preserves the conjugacy property between successive search directions. Furthermore, it significantly improves both the accuracy and convergence speed compared to traditional nonlinear conjugate gradient schemes, such as the method.

Keywords: gradient algorithm, trinomial

تحسين خوارزمية التدرج المترافق ثلاثي الحدود في الامثلية غير المقيدة

عبير عبدالخالق احمد، هدى عصام احمد
قسم الرياضيات، كلية علوم الحاسوب والرياضيات، جامعة الموصل، الموصل، العراق
قسم بحوث العمليات والتقنيات الذكائية، كلية علوم الحاسوب والرياضيات، جامعة الموصل، الموصل، العراق
, dr.hudaea@uomosul.edu.iqabeeraldabagh@uomosul.edu.iq

الملخص:

يُقترح في هذا البحث خوارزمية جديدة من نوع متجه التدرج المرافِق بثلاثة حدود لحل مسائل التحسين غير المقيدة بكفاءة. مقارنةً بخوارزميات متجه التدرج المرافِق غير الخطية التقليدية، تتصف اتجاهات البحث في هذه الخوارزمية بأنها تحقق شرط الانحدار الكافي والتقارب الشامل. الحد الثالث في صيغة التدرج المترافق يستخدم عادة كتصحيح اضافي لتحسن استقرار الحسابات في المسائل ذات الابعاد الكبيرة، يقلل من تراكم الاخطاء الناتجة عن العمليات العددية اثناء التكرارات الكبيرة، يمنع اتجاه البحث من الانحراف عن خاصية الترافق، وكذلك يجعل الخوارزمية أكثر دقة وسرعة عند مقارنتها مع الصيغ التقليدية مثل ($\beta_k^{FR}, \beta_k^{HS}$).

كلمات مفتاحية : خوارزمية التدرج ، ثلاثي الحدود

1- المقدمة

نظرا لان مشكلات التحسين غير المقيدة غالبا ما تنشأ من الحوسبة العمية واستخراج البيانات الضخمة [2] ، فمن المهم تطوير خوارزميات عددية فعالة لحل هذه المشكلات. ومع ذلك يبدو انه لا توجد خوارزمية متاحة في الادبيات تتمتع بمكانة رائدة عند استخدامها لحل جميع مشكلات التحسين غير المقيدة مقارنة بخوارزميات اخرى مماثلة [3]. لهذا السبب دأب العديد من الباحثين على دراسة اساليب عددية جديدة لحل مشكلات التحسين غير المقيدة [16]

رياضياً فأن مسائل التحسين غير المقيدة تعرف بالصيغة التالية:

$$\min_{x} f(x) \qquad (1)$$

اذ أن $x \in R^n$ متجه حقيقي و $f: R^n \to R$ دالة قابلة للاشتقاق بصورة مستمرة، g_k هي مشتقة الدالة عند x_k .[17].

ولكفاءة طرق التدرج المترافق (CG) في حل المسائل الغير مقيدة والمعرفة في المعادلة (1) فأن الشكل التكراري لتوليد شلشلة من الحلول المثلى التقريبية هو :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \qquad (2)$$

حيث x_0 هو حل ابتدائي و d_k هو متجه البحث و α_k هو حجم الخطوة على طول المتجه d_k وبشكل عام فان اتجاهات البحث في طرق الترج المترافق (CG) التقليدية تعرف بالصيغة التالية:

$$d_{k+1} = \begin{cases} -g_{k+1} & If\ k = 0 \\ -g_{k+1} + \beta_k\, d_k, & k = 1,2,\dots,n \end{cases}, \qquad (3)$$

حيث β_k هو معامل الترافق والذي يتم حسابه بالطرق الكلاسيكية المعروفة $(\beta_k^{HS}, \beta_k^{FR}, \beta_k^{PR}, \beta_k^{LS})$:

,[7],[6],[5],[4]

هذا النوع من طرق التدرج المترافق يسمى بالكلاسيكي او الثنائي ومن ثم تم اقتراح صيغة جديدة من التدرج المترافق والتي يطلق عليها بالتدرج المترافق ثلاثي الحدود.

أول من قدم التدرج المترافق ذو الحدود الثلاثة هو العالم Nazareth [19] والمعرفة بالصيغة التالية:

$$d_{k+1} = -y_k + \frac{y_k^T y_k}{y_k^T d_k} d_k - \frac{y_{k-1}^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}} d_{k-1} \qquad (4)$$

ومن ثم قدم العالمان [12] ,[13] صيغ جديدة للتدرج المترافق ذو الحدود الثلاثة ومعرفة بالمعادلة التالية:

$$d_{k+1}^{TTPR} = -g_{k+1} + \beta_k^{PR}{}_k - \left(\frac{g_{k+1}^T d_k}{g_k^T g_k}\right) y_k \quad (5)$$

$$d_{k+1}^{TTHS} = -g_{k+1} + \beta_k^{HS} d_k - \left(\frac{g_{k+1}^T d_k}{d_k^T y_k}\right) y_k \quad (6)$$

كذلك قدم العالم Andrei أكثر من صيغة للتدرج المترافق ذو الحدود الثلاثة حيث يعتبران نسخة معدلة من طريقة CG القياسية ومعرفة بالشكل:

$$d_{k+1}^{TTAN} = -\frac{y_k^T d_k}{\|g\|^2} g_{k+1} + \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|g\|^2} d_k - \frac{g_{k+1}^T d_k}{\|g\|^2} y_k \quad (7)$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} - \frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k} y_k - (t_k \frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k} - \frac{g_{k+1}^T y_k}{y_k^T d_k}) d_k \quad (8)$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} - \frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k} y_k - (t_k \frac{g_{k+1}^T d_k}{y_k^T d_k} - \frac{g_{k+1}^T y_k}{y_k^T d_k}) d_k \quad (9)$$

وان الثابت t معرف ($t_k = 2\frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k}, t_k = \frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k}$)على التوالي.

[11],[10],[9]

وحديثا قدم Liu وأخرون [13] صيغة جديدة معرفة بالمعادلة التالية:

$$d_{k+1}^{TTLIU} = -g_{k+1} + \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|d\|^2} d_k - \frac{g_{k+1}^T d_k}{\|d\|^2} y_k \quad (10)$$

حيث ان الحد الثاني من المعادلة (10) $\beta^{RMLI} = \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|d\|^2}$ تم اقتراحها من قبل Rivaie واخرون.

[6]. جميع هذه الصيغ تحقق شرط الانحدار الكافي والتقارب الشامل.

2- إشتقاق صيغة مطورة من التدرج المترافق ثلاثي الحدود

بدافع الحاجة الى تحسين الكفاءة العددية لطريقة التدرج المترافق بشكل أكبر تم تطوير خوارزمية جديدة ثلاثية الحدود بالاستفادة من المعادلة (10).

من متسلسلة تايلر:

$$f_{k+1} = f_k + s_k^T g_k + \frac{1}{2} s_k^T G\, s_k \qquad (11)$$

$$f_{k+1} = f_k + s_k^T g_k + s_k^T g_{k+1} - s_k^T g_{k+1} + \frac{1}{2} s_k^T y_k$$

$$f_{k+1} = f_k - (s_k^T g_{k+1} - s_k^T g_k) + s_k^T g_{k+1} + \frac{1}{2} s_k^T y_k$$

$$s_k^T g_{k+1} = f_{k+1} - f_k + s_k^T y_k - \frac{1}{2} s_k^T y_k$$

$$s_k^T g_{k+1} = f_{k+1} - f_k + 0.5\, s_k^T y_k \qquad (12)$$

وبتعويض المعادلة (11) في المعادلة (10) نحصل على :

$$d_{k+1}^{TTAH} = -g_{k+1} + \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|d\|^2}\, d_k - \frac{(f_{k+1} - f_k + 0.5\, s_k^T y_k)}{\|d\|^2}\, y_k \qquad (13)$$

وبذلك نحصل على صيغة جديده لمتجه ذو الثلاث حدود ومعرف بالمعادلة (13) .

3- الخوارزميَّة

الخطوة 1: اختر قيمة ابتدائية $x_0 \in R^n$، ϵ ∈ ,k=0.

الخطوة 2: احسب $d_0 = -g_0$

الخطوة 3: احسب طول الخطوة $\alpha_k > 0$ يحقق شرطي وولف (Wolfe condition):

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

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq -\sigma\, g_k^T d_k$$

ومن ثم احسب x_{k+1} حسب المعادلة (2).

الخطوة 4: احسب $\|g_k\| < 10^{-5}$، عندئذٍ توقف، وإلَّا فاستمر.

الخطوة 5: احسب قيمة المتجه الجديد d_{k+1}^{TTAH} المعرف في المعادلة (13).

الخطوة 6: إذا تحقق: Powell Restart ، اذهب إلى الخطوة 2 وإلَّا فاستمر.

الخطوة 7: ضع k=k+1 واذهب إلى الخطوة 3.

4- شرط الانحدار الكافي

في هذه الفقرة سوف نبرهن شرط الانحدار الكافي والتقارب الشامل للخوارزميَّة المقترحة باستخدام خط بحث غير مضبوط.

1-4 مبرهنة الانحدار الكافِ

لتكن المتتابعة $\{x_{k+1}\}$ في (2) تتولد من الخوارزمية (3) وان طول الخطوة $\boldsymbol{\alpha k}$ يحقق شرطي Wolfe عندئذٍ فان المتجه الجديد الموضح في المعادلة (13) يحقق

شرط الانحدار الكافي:

البرهان:

نضرب طرفيي المعادلة (13) ب $\left(\frac{g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2}\right)$ نحصل على:

$$\frac{d_{k+1}^{\mathrm{T}} g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} + 1 = \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|d\|^2} \frac{d_k^{\mathrm{T}}\, g_{k+1}}{\|g_{k+1}\|^2} - \frac{(f_{k+1} - f_k + 0.5\, s_k^T y_k)}{\|d\|^2} \frac{g_{k+1}^{\mathrm{T}} y_k}{\|g_{k+1}\|^2} \qquad (14)$$

بما أنَّ $y_k^{\mathrm{T}} g_{k+1} \le \|y_k\|\|g_{k+1}\|$ وبالاستفادة من شرطي وولف نحصل على :

$$\le \frac{\|y_k\|\|g_{k+1}\|}{\|d\|^2} \frac{(-\sigma d_k^{\mathrm{T}} g_k)}{\|g_{k+1}\|^2} - \frac{(\delta \alpha_k g_k^{\mathrm{T}} d_k + 0.5\, s_k^{\mathrm{T}} y_k)}{\|d\|^2} \frac{\|y_k\|\|g_{k+1}\|}{\|g_{k+1}\|^2} \qquad (15)$$

بما أنَّ $d_k^{\mathrm{T}} g_k \le \frac{-d_k^{\mathrm{T}} y_k}{(\sigma+1)}$ فإنَّ

$$\le \frac{\|y_k\|\|g_{k+1}\|}{\|d\|^2} \frac{(\sigma d_k^{\mathrm{T}} y_k)}{(\sigma+1)\|g_{k+1}\|^2} - \frac{\left(\delta \alpha_k \frac{-d_k^{\mathrm{T}} y_k}{(\sigma+1)} + 0.5\, \alpha_k d_k^T y_k\right)}{\|d\|^2} \frac{\|y_k\|}{\|g_{k+1}\|}$$

$$\leq \frac{\|y_k\|\|g_{k+1}\|}{\|d\|^2}\ \frac{(\sigma d_k^{\mathrm{T}} y_k)}{(\sigma+1)\|g_{k+1}\|^2} + \left[\frac{(\delta\alpha_k)}{(\sigma+1)} - 0.5\delta\alpha_k\right]\left(\frac{d_k^T y_k}{\|d\|^2}\right)\left(\frac{\|y_k\|}{\|g_{k+1}\|}\right) \qquad (16)$$

ليكن $\widehat{c_4} = \frac{(\delta\alpha_k)}{(\sigma+1)}$, $\widehat{c_5} = 0.5$ ، $\widehat{c_3} = \frac{\|y_k\|\|g_{k+1}\|}{\|d\|^2}\ \frac{(\sigma d_k^{\mathrm{T}} y_k)}{(\sigma+1)\|g_{k+1}\|^2}$

وكل منهما كمية موجبة، اذن بالنسبة للحد الثاني من المعادلة (13) توجد حالتان:

الحالة الاولى: عندما $\widehat{c_4}$ اكبر من $\widehat{c_5}$ عندئذ فان جميع الحدود من المعادلة (13) تكون موجبة ولتكن تساوي قيمة معينة مثل μ، اذن

$$d_{k+1}^{\mathrm{T}} g_{k+1} \leq -(1-\mu)\|g_{k+1}\|^2 \qquad (17)$$

الحالة الثانية: عندما $\widehat{c_4}$ اقل من $\widehat{c_5}$ اهمل الحد الاخير وعليه فان جميع الحدود من المعادلة (16) تكون ايضا موجبة وتحقق شرط الانحدار الكافي.

2-4 مبرهنة التقارب الشامل للطريقة المقترحة

بافتراض تحقق الفرضية (A)، وأنَّ f(x) دالة محدبة، واتجاه البحث محدد بالمعادلة (13)، هو اتجاه انحدار كافٍ وإذا كان:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\|d_{k+1}\|^2} = \infty$$

فإنَّ

$$\lim_{k\to\infty} inf\|g_{k+1}\| = 0 \qquad (18)$$

البرهان:

من المعادلة (13)

$$d_{k+1}^{TTAH} = -g_{k+1} + \beta^{RMLI}\, d_k - \frac{(f_{k+1} - f_k + 0.5\, s_k^T y_k)}{\|d\|^2}\, y_k$$

$$\left\| d_{k+1}^{TTAH} = -g_{k+1} + \beta^{RMLI}\, d_k - \frac{(f_{k+1} - f_k + 0.5\, s_k^T y_k)}{\|d\|^2}\, y_k \right\|$$

وبما ان:

$$|\beta_k^{RMIL}| \le \varpi \tag{19}$$

$$\|d_{k+1}^{TTAH}\| \le \|g_{k+1}\| + |\beta_k^{RMIL}|\|d_k\| + \frac{|f_{k+1} - f_k| + |0.5\, s_k^T y_k|}{\|d_k\|^2}\|y_k\|$$

ومن الاستفادة من شرط وولف ومن خواص الدالة المحدبة نحصل على:

$$\le B + \varpi\|d_k\| + \frac{|\delta\alpha_k g_k^T d_k| + 0.5\, L\, \|S_k\|^2}{\|d_k\|^2}\|y_k\|$$

لتكن $\|y_k\| = D_1 \,, \|d_k\| = D_2$

وبما أن كل $d_k = -g_k$

$$\|d_{k+1}\| \le B + \varpi D_2 + \frac{(\delta\alpha_k\|g_k\|^2 + 0.5\, L\, \|S_k\|^2)}{D_2} D_1$$

لتكن $v = (B + \varpi D_1 + \frac{(\delta\alpha_k\|g_k\|^2 + 0.5\, L\, \|S_k\|^2)}{D_2} D_2$

$$\|d_{k+1}\| = v$$

$$\sum_{k\ge1}\frac{1}{\|d_{k+1}\|^2} \ge \frac{1}{v^2}\sum_{k\ge1} 1 = \infty \tag{20}$$

5 - النتائج العددية

اجريت التجارب العددية لتقييم فعالية وخاصيه الاستقرار للخوارزمية الجديدة عند تطبيقها على مسائل امثليه غير مقيده تم اختبار الطريقة على مجموعه من 50 داله معياريه بأبعاد متغيره (n=100,5000,10000) ولكي نبين أداء الخوارزمية المقترحة اختبرتُ مجموعة من الدوال اللاخطية في الأمثلية غير المقيدة [15] ولإبراز أداء الخوارزمية المقترحة (TTAH) المعرفة بالمعادلة (13) تم مقارنتها مع ثلاث خوارزميات فعاله ذات الحدود الثلاثة وهي (TTHS) والمعرفة بالمعادلة (6) و(TTAN) والمعرفة بالمعادلة (7) وكذلك (TTLIU)والمعرفة بالمعادلة (10). تم باستخدام شرط وولف القوي ($\delta = 0.9, \sigma = 0.001$) حيث تعتمد جميع الخوارزميات المستخدمة في هذه الدراسة على استراتيجية خط البحث غير المضبوط (ILS).

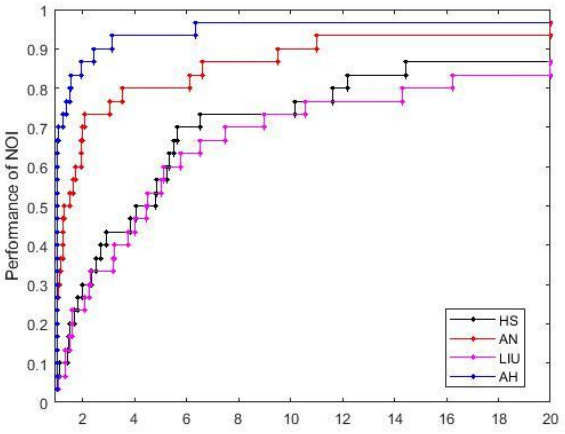
إن تقييم هذه الخوارزميات ومقارنتها يعتمد على:

1. (NOF): العدد الكلي للدوال المحسوبة (Number of Function).
2. (NOI): العدد الكلي للتكرارات (Number of Iteration).
3. (CPU): الوقت المستغرق في معالجة المسألة.

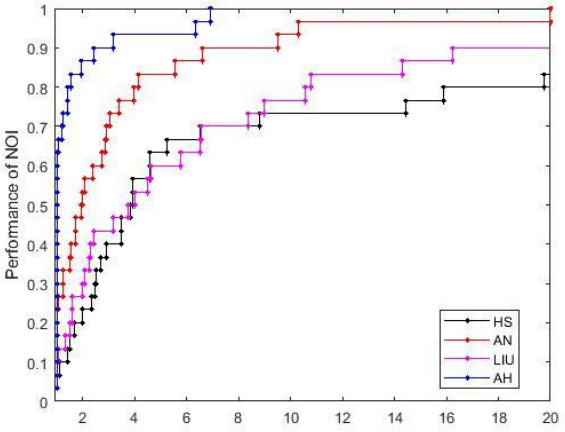
وقد اعتُمِد مقياس توقف موحّد في جميع الحالات بهدف ضمان دقة النتائج وإمكانية مقارنتها بشكل موضوعي

$$\|g_{k+1}\| \le 10^{-5} \tag{21}$$

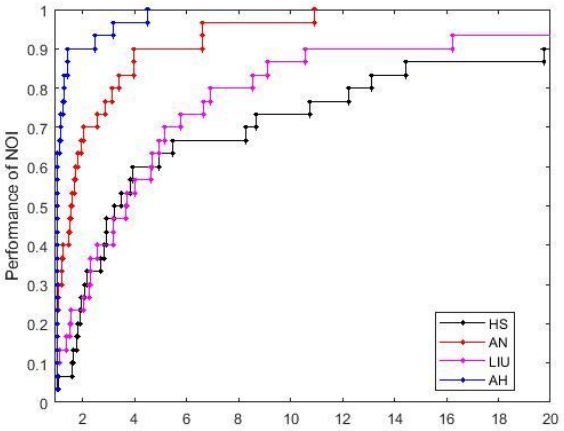
استخدمنا منحنيات الاداء [14] لعرض أداء هذه التقنيات المصممة خصيصًا لتحليل وعرض الأداء العددي، فضلا عن ذلك ابرزت النتائج العددية والموضحة في الاشكال (1),(2)و (3)أن الخوارزمية الجديدة حققت اداء متميزا في العديد من المسائل الاختبارية عند حساب (NOF) وعندما n=100, 5000, 10000 مقارنه بالطرق الاخرى وكذلك الاشكال (4), (5) , (6) توضح تفوق اداء الخوارزمية الجديدة عند حساب (NOI) وعندما n=100,5000, 10000 ايضا الاشكال(7), (8) , (9) توضح تفوق اداء الخوارزمية الجديدة عند حساب (CPU) وعندما n=100, 5000, 10000 وهذا يشير الى كفاءة الخوارزمية الجديدة وعدها خيارا قويا للمسائل ذات الابعاد الكبيرة.



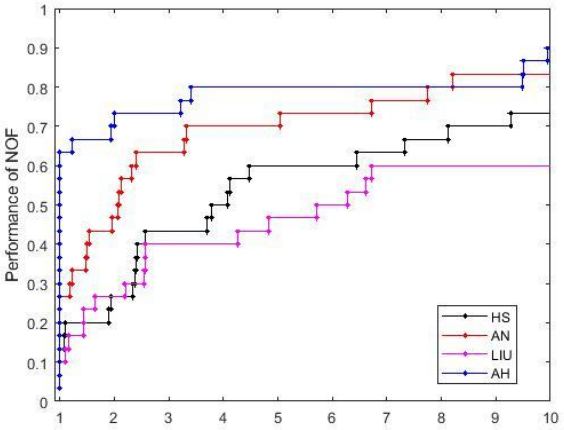
الشكل (1) يوضح حساب NOF عندما n=100



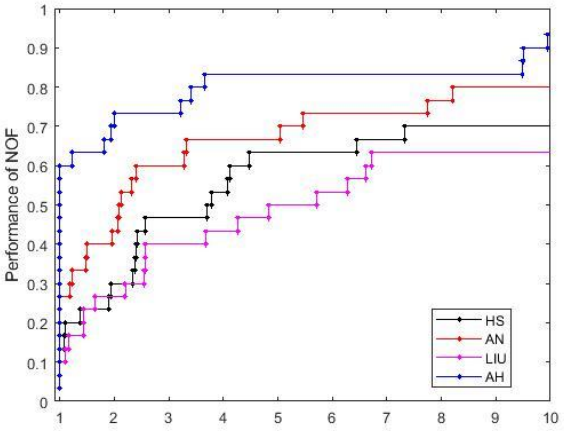
الشكل (2) يوضح حساب NOF عندما n=5000



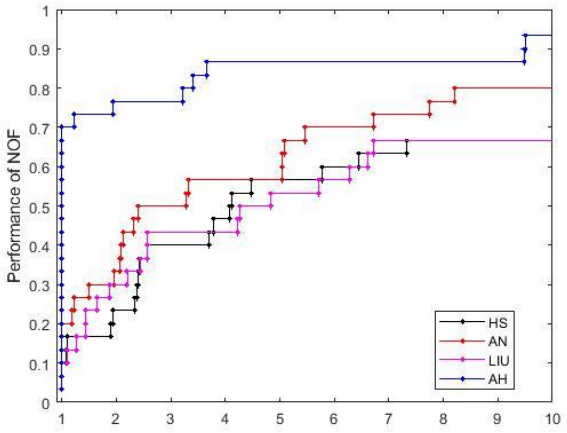
الشكل (3) يوضح حساب NOF عندما n=10000



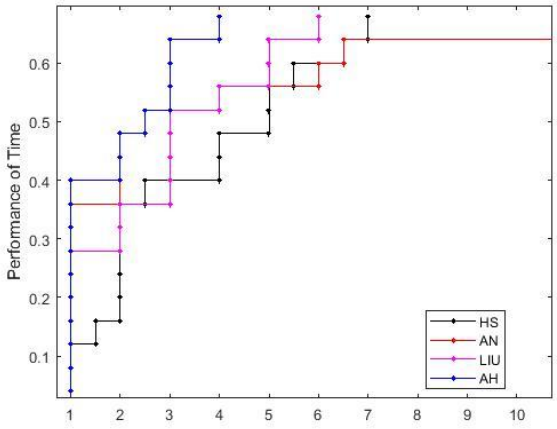
الشكل (4) يوضح حساب NOI عندما n=100



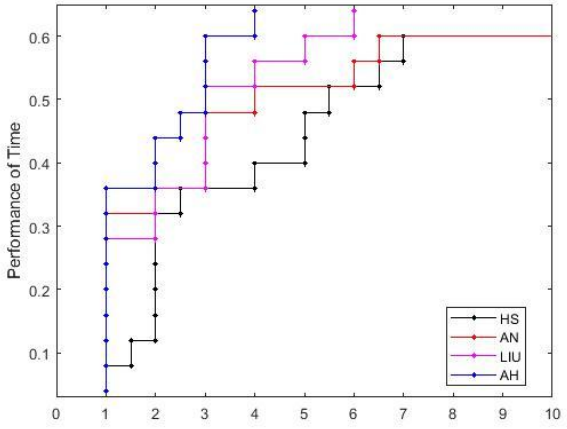
الشكل (5) يوضح حساب NOI عندما n=5000



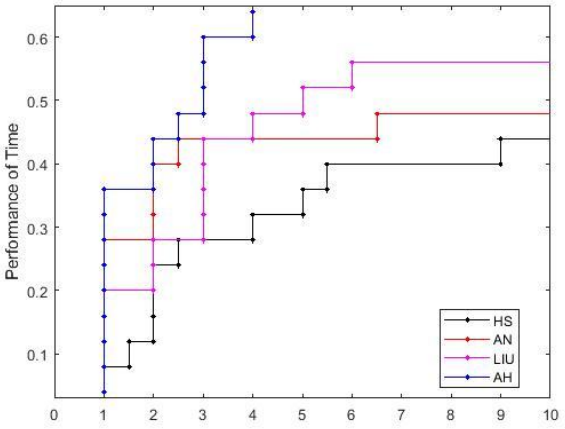
الشكل (6) يوضح حساب NOI عندما n=10000



الشكل (7) يوضح حساب CPU عندما n=100



الشكل (8) يوضح حساب CPU عندما n=5000



الشكل (9) يوضح حساب CPU عندما n=1000

المصادر

[1] J. Y. Tang, Z. Wan, Orthogonal dual graph-regularized nonnegative matrix
factorization for coclustering, J. Sci. Comput., 87 (2021), 1–37.
https://doi.org/10.1007/s10915-021-01489-w
[2] T. Li, Z. Wan, New adaptive barzilar-borwein step size and its application in solving
large scale optimization problems, ANZIAM J., 61 (2019), 76–98.
https://doi.org/10.1017/S1446181118000263
[3] Z. Wan, C. Q. Yu, Reutilization of the existent sales network for recycling unwanted
smartphones by nonlinear optimization, J. Cleaner Prod., 350 (2022), 131349.
https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.131349
[4] Fletcher, R., (1987), Practical Methods of Optimization, 2nd ed., A Wiley-
Intercedence Publication, John Wiley & Sons, Inc., NY, USA.
[5] Hestenes, M. R. and Stiefel, E., (1952), Methods of conjugate gradients for solving
linear systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol. 5, No.
49, pp. 409-436.
[6] Polak, E., and Ribiere, G., (1969), Not sur la convergence de directions conjugue'e.
Rev. Franaise Informant Research operationelle, 3e Anne'e., Vol. 16, pp. 35-43.

[7] Liu, G., Han, J. and Yin, H., (1995), Global convergence of the Fletcher-Reeves
algorithm with inexact line search, Appl. Math. J. China Univ. Ser. B, Vol. 10, pp.
75-82.
[8] W. W. Hager, H. C. Zhang, A new conjugate gradient method with guaranteed
descent and an e_cient line search, SIAM J. Optim., 16 (2005), 170–192.
http://doi.org/10.1137/030601880
[9] N. Andrei, A modified Polak-Ribi`ere-Polyak conjugate gradient algorithm for
Unconstrained optimization, Optimization, 60 (2011), 1457–1471.
http://doi.org/10.1080/02331931003653187
[10] N. Andrei, A simple three-term conjugate gradient algorithm for unconstrained
optimization, J. Comput. Appl. Math., 241 (2013), 19–29.
http://doi.org/10.1016/j.cam.2012.10.002
[11] N. Andrei, On three-term conjugate gradient algorithms for unconstrained
optimization, Appl. Math. Comput., 219 (2013), 6316–6327.
http://doi.org/10.1016/j.amc.2012.11.097
[12] L. Zhang, W. Zhou, D. H. Li, A descent modified Polak-Ribi`ere-Polyak conjugate
gradient method and its global convergence, IMA J. Numer. Anal., 26 (2006), 629–
640. http://doi.org/10.1093/imanum/drl016
[13] J. K. Liu, Y. M. Feng, L. M. Zou, Some three-term conjugate gradient methods with
the inexact line search condition, Calcolo, 55 (2018), 16.
http://doi.org/10.1007/s10092-018-0258-3
[14] Dolan, E. D. and Moré, J. J. (2002) ‘Benchmarking optimization softwarewith
performance profiles’, Mathematical Programming, Series B, 91(2), pp. 201–213.
doi: 10.1007/s101070100263.
[15] N. Andrei, An unconstrained optimization test functions collection, Adv. Model.
Optim., 10 (2008), 147–161
[16] J. Guo, Z. Wan, A new three-term spectral conjugate gradient algorithm with higher

numerical performance for solving large scale optimization problems based on

Quasi-Newton equation, Int.J. Model. Simul. Sci. Comput., 12 (2021), 2150053.

http://doi.org/10.1142/S1793962321500537

[17] Jorge Nocedal Stephen J. Wright (2006) Numerical Optimization, springer.

doi: 10.1103/PhysRev.83.134.

[18] Rivaie, M., Mamat, M., June, L.W., Mohd, I.: A new class of nonlinear conjugate gradient coefficients with global convergence properties.

Appl. Math. Comput. 218(22), 11323–11332 (2012).

[19] L. Nazareth, A conjugate direction algorithm without line searches, J. Optim. Theory

Appl., 23 (1977), 373–387. http://doi.org/10.1007/BF00933447