Методы оптимизации

Лекция 3

17 марта 2023 г.

МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Метод Ньютона

Предположим, что функция f выпукла и дважды дифференцируема на $\mathbb{R}^n$, причем матрица $\nabla^2 f(x)$ невырождена на $\mathbb{R}^n$. В методе Ньютона последовательность x^0, x^1, x^2, ... генерируется, исходя из следующих соображений. По определению дважды дифференцируемой функции, для очередной точки x^k имеем

$$f(x) - f(x^k) = \left(\nabla f(x^k), x - x^k\right) + \\ + \frac{1}{2}\left(\nabla^2 f(x^k)(x - x^k), x - x^k\right) + o\left(\|x - x^k\|^2\right)$$

Для определения следующей точки x^{k+1} минимизируется квадратичная часть приращения $f(x) - f(x^k)$, т. е. решается задача

$$f_k(x) = \left(\nabla f(x^k), x - x^k\right) + \frac{1}{2}\left(\nabla^2 f(x^k)(x - x^k), x - x^k\right) \to \min, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

Необходимое и достаточное условие минимума имеет вид

$$\nabla f_k(x) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) = 0$$

$$\nabla f_k(x) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)(x - x^k) = 0$$

Решая полученную систему линейных уравнений и принимая найденную точку минимума за x^{k+1}, получаем

$$x^{k+1} = x^k + h^k, \quad h^k = -\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$$

Теорема 1.

Пусть $f(x)$ дважды дифференцируема, $\nabla^2 f(x)$ удовлетворяет условию Липшица с константой L, $f(x)$ сильно выпукла с константой l и начальное приближение удовлетворяет условию

$$q = \left(Ll^{-2}/\,2\right) \left\|\nabla f(x^0)\right\| < 1$$

Тогда метод Ньютона сходится к точке минимума x^* с квадратичной скоростью

$$\left\|x^k - x^*\right\| \leqslant (2l/L)q^{2^k}.$$

- Сходимость метода Ньютона доказана лишь для достаточно хорошего начального приближения x^0. При этом условие, гарантирующее сходимость для данного начального приближения, труднопроверяемо, так как фигурирующие в нём константы, как правило, неизвестны.
- Сложность отыскания нужного начального приближения является недостатком метода Ньютона. Ещё более существенным недостатком является высокая трудоёмкость метода, обусловленная необходимостью вычисления и обращения на каждом шаге матрицы вторых производных минимизируемой функции.

Пусть $f(x)$ дважды дифференцируема в точке $x^* \in \mathbb{R}$, причём $\nabla f(x^*) = 0$, т. е. x^* — стационарная точка.

Тогда, если матрица $\nabla^2 f(x^*)$ является положительно (отрицательно) определённой, то x^* — точка локального минимума (максимума); если матрица $\nabla^2 f(x^*)$ является неопределённой, то x^* — седловая точка.

Для проверки знакоопределённости матрицы, используется

Критерий Сильвестра

Симметричная матрица является положительно определённой в том и только том случае, если все её угловые миноры положительны. Для отрицательной определённости квадратичной формы необходимо и достаточно, чтобы угловые миноры чётного порядка её матрицы были положительны, а нечётного порядка — отрицательны.

Угловые миноры

Пусть матрица A $(a_{ij} = a_{ji};\ i, j = 1, \ldots, n)$ имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Угловыми минорами этой матрицы являются:

$$\Delta_1 = a_{11}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \ldots, \quad \Delta_n = \begin{vmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \ldots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Как видим, угловой минор порядка k расположен на пересечении первых k строк и первых k столбцов матрицы. Угловой минор максимального, n-го порядка представляет собой определитель матрицы.

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число итераций. Найти в произвольной точке градиент функции $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x) = \nabla^2 f(x)$.

2. Принять $k := 0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon_1$:

   - если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$;
   - если критерий не выполнен, то перейти к п. 5;

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$:

   - если неравенство выполнено, то расчёт окончен: $x^* := x^k$;
   - если нет, то перейти к п. 6.

6. Вычислить матрицу $H(x^k)$.

7. Вычислить матрицу $H^{-1}(x^k)$.

8. Проверить выполнение условия $H^{-1}(x^k) > 0$ (матрица положительно определена). Если $H^{-1}(x^k) > 0$, то перейти к п. 9; иначе перейти к п. 10, приняв $d^k := -\nabla f(x^k)$.

9. Определить $d^k := -H^{-1}(x^k)\nabla f(x^k)$.

10. Вычислить $x^{k+1} := x^k + t_k d^k$, приняв $t_k := 1$, если $d^k = -H^{-1}(x^k)\nabla f(x^k)$ или выбрав t_k из условия $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, если $d^k = -\nabla f(x^k)$.

11. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{k+1} - x^k\right\| \leqslant \varepsilon_2, \quad \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leqslant \varepsilon_2$$

– если оба условия выполнены при текущем значении k и при $k-1$, то расчёт окончен и $x^* := x^{k+1}$;
– если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k := k+1$ и перейти к п. 3.

Придать методу Ньютона свойство глобальной сходимости можно различными способами. Один из них связан с регулировкой длины шага:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$$

Параметр γ_k может выбираться по-разному, например

$$\gamma_k = \arg\min_{\gamma \geqslant 0} f\left(x^k - \gamma \left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)\right)$$

или γ дробится (умножается на $0 < a < 1$), начиная с $\gamma = 1$, до выполнения условия

$$f(x^{k+1}) \leqslant f(x^k) - \gamma q \left(\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k), \nabla f(x^k)\right), \quad 0 < q < 1$$

или условия

$$\left\|\nabla f(x^{k+1})\right\|^2 \leqslant (1 - \gamma q)\left\|\nabla f(x^k)\right\|^2, \quad 0 < q < 1$$

- Для гладких сильно выпуклых функций метод Ньютона с регулировкой шага глобально сходится
- Что касается скорости сходимости, то на начальных итерациях можно утверждать лишь сходимость со скоростью геометрической прогрессии.
- При попадании в окрестность x^*, в которой выполняются условия теоремы 1, будет иметь место квадратичная сходимость.

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число итераций. Найти в произвольной точке градиент функции $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x) = \nabla^2 f(x)$.

2. Принять $k := 0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon_1$:

   – если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$;
   – если критерий не выполнен, то перейти к п. 5;

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$:

   – если неравенство выполнено, то расчёт окончен: $x^* := x^k$;
   – если нет, то перейти к п. 6.

6. Вычислить матрицу $H(x^k)$.

Алгоритм.

7. Вычислить матрицу $H^{-1}(x^k)$.

8. Проверить выполнение условия $H^{-1}(x^k) > 0$:

   – если $H^{-1}(x^k) > 0$, то найти $d^k := -H^{-1}(x^k)\nabla f(x^k)$;
   – если $H^{-1}(x^k) \leqslant 0$, то принять $d^k := -\nabla f(x^k)$.

9. Найти шаг t_k^* из условия $\varphi(t_k) = f(x^k + t_k d^k) \to \min\limits_{t_k}$

10. Вычислить $x^{k+1} := x^k + t_k^* d^k$.

11. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{k+1} - x^k\right\| \leqslant \varepsilon_2, \quad \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leqslant \varepsilon_2$$

   – если оба условия выполнены при текущем значении k и при $k-1$, то расчёт окончен и $x^* := x^{k+1}$;
   – если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k := k+1$ и перейти к п. 3.

Метод Левенберга—Марквардта

В этом методе само направление движения отличается от задаваемого методом Ньютона.

Добавим к аппроксимирующей функции квадратичный штраф за отклонение от точки x^k, т. е. будем искать x^{k+1} из условия

$$f_k(x) + \frac{\alpha_k}{2}\left\|x - x^k\right\|^2 \to \min$$

при

$$f_k(x) = \left(\nabla f(x^k), x - x^k\right) + \frac{1}{2}\left(\nabla^2 f(x^k)(x - x^k), x - x^k\right) \to \min, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

Тогда приходим к методу

$$x^{k+1} = x^k - \left(\nabla^2 f(x^k) + \alpha_k I\right)^{-1} \nabla f(x^k).$$

При $\alpha_k = 0$ метод переходит в метод Ньютона, при $\alpha_k \to \infty$ направление движения стремится к антиградиенту. Таким образом, метод представляет собой компромисс между этими двумя методами.

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon > 0$, M — предельное число итераций. Найти в произвольной точке градиент функции $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x) = \nabla^2 f(x)$.

2. Принять $k := 0$, $\mu^k := \mu^0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon$:

   - если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$;
   - если критерий не выполнен, то перейти к п. 5;

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$:

   - если неравенство выполнено, то расчёт окончен: $x^* := x^k$;
   - если нет, то перейти к п. 6.

Алгоритм.

6. Вычислить матрицу $H(x^k)$.
7. Вычислить матрицу $H(x^k) + \mu^k I$.
8. Вычислить матрицу $[H(x^k) + \mu^k I]^{-1}$.
9. Вычислить $d^k := -[H(x^k) + \mu^k I]^{-1} \nabla f(x^k)$.
10. Вычислить $x^{k+1} := x^k + d^k$.
11. Проверить выполнение условия $f(x^{k+1}) < f(x^k)$,
    - если условие выполняется, то перейти к п. 12;
    - если нет, то перейти к п. 13.
12. Принять $k := k + 1$, $\mu^{k+1} := \dfrac{\mu^k}{2}$ и перейти к п. 3.
13. Принять $\mu^k := 2\mu^k$ и перейти к п. 7.

МНОГОШАГОВЫЕ МЕТОДЫ

В градиентном методе на каждом шаге никак не используется информация, полученная на предыдущих итерациях. Естественно попытаться учесть «предысторию» процесса для ускорения сходимости. Такого рода методы, в которых новое приближение зависит от s предыдущих:

$$x^{k+1} = \varphi_k(x^k, \ldots, x^{k-s+1})$$

называются s-*шаговыми*. Градиентный метод и метод Ньютона были одношаговыми, теперь рассмотрим *многошаговые* $(s > 1)$ методы.

Одним из простейших многошаговых методов является двухшаговый метод тяжёлого шарика

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k) + \beta(x^k - x^{k-1}), \tag{1}$$

где $\alpha > 0$, $\beta \geqslant 0$ — некоторые параметры.

При $\beta = 0$ метод переходит в градиентный.

Своё название метод получил из-за следующей физической аналогии. Движение тела («тяжёлого шарика») в потенциальном поле при наличии силы трения (или вязкости) описывается дифференциальным уравнением второго порядка

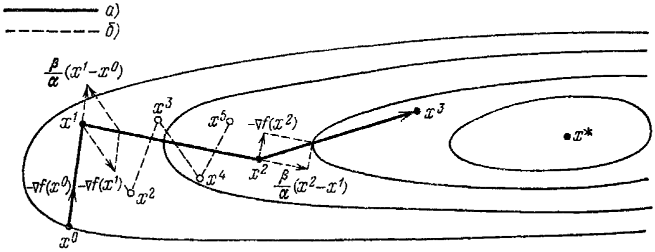
$$\mu \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\nabla f(x(t)) - p \frac{dx(t)}{dt} \tag{2}$$

Из-за потери энергии на трение тело в конце концов окажется в точке минимума потенциала $f(x)$. Таким образом, тяжёлый шарик «решает» соответствующую задачу минимизации.

Если рассмотреть разностный аналог уравнения (2), то придём к итерационному методу (1).

Введение инерции движения (слагаемое $\beta(x^k - x^{k-1})$) в итерационный процесс может привести к ускорению сходимости.

Вместо зигзагообразного движения в градиентном методе в данном случае получается более плавная траектория по «дну оврага».



Метод тяжёлого шарика (а) и градиентный метод (б)

Эти эвристические соображения подкрепляются следующей теоремой.

Теорема 2.

Пусть x^* — невырожденная точка минимума $f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$. Тогда при

$$0 \leqslant \beta < 1, \quad 0 < \alpha < 2(1+\beta)/L, \quad lI \leqslant \nabla^2 f(x^*) \leqslant LI$$

найдётся $\varepsilon > 0$ такое, что при любых x^0, x^1, $\left\|x^0 - x^*\right\| \leqslant \varepsilon$, $\left\|x^1 - x^*\right\| \leqslant \varepsilon$ метод (1) сходится к x^* со скоростью геометрической прогрессии:

$$\left\|x^k - x^*\right\| \leqslant c(\delta)(q+\delta)^k, \quad 0 \leqslant q < 1, \quad 0 < \delta < 1 - q.$$

Величина q минимальна и равна

$$q^* = \frac{\sqrt{L} - \sqrt{l}}{\sqrt{L} + \sqrt{l}} \quad \text{при} \quad \alpha^* = \frac{4}{\left(\sqrt{L} + \sqrt{l}\right)^2}, \quad \beta^* = \left(\frac{\sqrt{L} - \sqrt{l}}{\sqrt{L} + \sqrt{l}}\right)^2.$$

Метод тяжёлого шарика. Сходимость

Сравним скорость сходимости, даваемую одношаговым и двухшаговым методами при оптимальном выборе параметров. И в том, и в другом случаях имеем сходимость со скоростью геометрической прогрессии, но знаменатель прогрессии для одношагового метода равен

$$q_1 = (L - l)/(L + l),$$

а для двухшагового

$$q_2 = (\sqrt{L} - \sqrt{l})/(\sqrt{L} + \sqrt{l}).$$

Для больших значений числа обусловленности $\mu = L/l$

$$q_1 \approx 1 - 2/\mu, \quad q_2 \approx 1 - 2/\sqrt{\mu}$$

Для плохо обусловленных задач метод тяжёлого шарика даёт выигрыш в $\sqrt{\mu}$ раз по сравнению с градиентным.

С вычислительной же точки зрения метод (1) немногим сложнее одношагового.

Метод сопряжённых градиентов

Высокая скорость сходимости метода Ньютона обусловлена тем, что он минимизирует квадратичную функцию

$$f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) \tag{3}$$

где A — симметрическая положительно определённая матрица размера $n \times n$, за один шаг.

Идея методов сопряжённых градиентов основана на стремлении минимизировать квадратичную функцию за конечное число шагов. Точнее говоря, в методах сопряжённых градиентов требуется найти направления $h^0, h^1, \dots, h^{n-1}$ такие, что последовательность n одномерных минимизаций вдоль этих направлений приводит к отысканию минимума квадратичной функции $f(x^n) = \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ при любом $x^0 \in \mathbb{R}^n$, где

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = \arg\min_{\alpha \geqslant 0} f(x^k + \alpha p^k) \tag{4}$$

Определение.

Векторы (направления) p' и p'' называются сопряжёнными (относительно матрицы A), если они отличны от нуля и $(Ap', p'') = 0$. Векторы (направления) $p^0, p^1, \dots, p^k$ называются взаимно сопряжёнными (относительно матрицы A), если все они отличны от нуля и $(Ap^i, p^j) = 0$, $i \neq j$, $0 \leqslant i, j \leqslant k$.

Теорема 3.

Если векторы p^k в методе (4) взаимно сопряжены, $k = 0, 1, \dots, n-1$, то для функции f, заданной формулой (3), и произвольной точки $x^0 \in \mathbb{R}^n$

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

Таким образом, метод (4) позволяет найти точку минимума квадратичной функции (3) не более чем за n шагов.

Метод Флетчера—Ривза

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = \arg\min_{\alpha \geqslant 0} f(x^k + \alpha p^k)$$

$$p^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k p^{k-1},$$

$$\beta_0 = 0, \quad \beta_k = \frac{\left\|\nabla f(x^k)\right\|^2}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2}$$

Метод Полака—Рибьера

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = \arg\min_{\alpha \geqslant 0} f(x^k + \alpha p^k)$$

$$p^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k p^{k-1},$$

$$\beta_0 = 0, \quad \beta_k = \frac{\left(\nabla f(x^k), \nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\right)}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2}$$

Метод сопряжённых градиентов можно интерпретировать как градиентный метод с памятью.

Из теоремы 3 следует, что методы дают точку минимума квадратичной функции в $\mathbb{R}^n$ за число итераций, не превосходящее n.

Иначе говоря, по скорости сходимости n шагов метода сопряжённых градиентов эквивалентны одному шагу метода Ньютона.

Разумеется, в неквадратичном случае теряются свойства конечности методов и они превращаются в, вообще говоря, бесконечные итерационные двухшаговые методы.

Как показывает опыт вычислений, для неквадратичного случая несколько более быструю сходимость обычно даёт метод Полака—Рибьера.

Оказывается, что в то же время в окрестности минимума он сходится с квадратичной скоростью.

Обычно для неквадратичных задач метод сопряжённых градиентов применяется в несколько иной форме. В него вводится процедура обновления — время от времени шаг делается как в начальной точке, т. е. по градиенту.

Наиболее естественно производить обновление через число итераций, равное размерности пространства:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = \arg\min_{\alpha \geqslant 0} f(x^k + \alpha p^k)$$

$$p^k = -\nabla f(x^k) + \beta_k p^{k-1},$$

$$\beta_k = \begin{cases} 0, & k = 0, n, 2n, \dots \\ \left\|\nabla f(x^k)\right\|^2 / \left\|\nabla f(x^{k-1})\right\|^2, & k \neq 0, n, 2n, \dots \end{cases}$$

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число итераций. Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)^{\mathsf{T}}$.

2. Принять $k := 0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon_1$. Если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$.

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$. Если неравенство выполнено, то расчёт окончен.

6. Вычислить

$$\beta_k := \begin{cases} 0, & k = 0, n, 2n, \ldots \\ \left\|\nabla f(x^k)\right\|^2 / \left\|\nabla f(x^{k-1})\right\|^2, & k \neq 0, n, 2n, \ldots \end{cases}$$

Алгоритм.

7. Определить $d^0 := -\nabla f(x^0)$ и $d^k := -\nabla f(x^k) + \beta_k d^{k-1}$ при $k \geqslant 1$.

8. Определить величину шага:

$$t_k^* = \arg\min_{t_k \geqslant 0} f(x^k + t_k d^k)).$$

9. Вычислить $x^{k+1} := x^k + t_k^* d^k$.

10. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{k+1} - x^k\right\| \leqslant \varepsilon_2, \quad \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leqslant \varepsilon_2$$

- если оба условия выполнены при текущем значении k и при $k-1$, то расчёт окончен и $x^* := x^k$;
- если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k := k+1$ и перейти к п. 3.

КВАЗИНЬЮТОНОВСКИЕ МЕТОДЫ

Общая идея методов

Сам метод Ньютона является методом второго порядка, т. е. использует вычисление вторых производных минимизируемой на $\mathbb{R}^n$ функции $f(x)$.

В основе квазиньютоновских методов лежит идея восстановления квадратичной аппроксимации функции по значениям её градиентов в ряде точек. Тем самым методы объединяют достоинства градиентного метода (не требуется вычисление матрицы вторых производных) и метода Ньютона (быстрая сходимость вследствие использования квадратичной аппроксимации).

В квазиньютоновских методах матрица вторых производных аппроксимируется с помощью информации о значениях градиентов функции $f(x)$, и эти методы, таким образом, являются методами первого порядка.

Квазиньютоновские методы имеют общую структуру:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k H_k \nabla f(x^k),$$

где матрица H_k пересчитывается рекуррентным способом на основе информации, полученной на k-й итерации, так что $H_k - [\nabla^2 f(x^k)]^{-1} \to 0$.

Таким образом, методы в пределе переходят в ньютоновский, что и объясняет их название.

Перейдём к вопросу о способах построения матриц H_k, аппроксимирующих $[\nabla^2 f(x^k)]^{-1}$. В принципе их можно формировать с помощью конечно-разностной аппроксимации. Из точки x^k можно сделать n «пробных шагов» длины α_k по координатным осям и вычислить в этих точках градиенты.

Однако такой прямолинейный способ аппроксимации неэкономен — в нём делается n пробных вычислений градиента на каждой итерации и никак не используются градиенты, найденные на предыдущих итерациях. Кроме того, в нём требуется обращать матрицу.

Основная идея квазиньютоновских методов заключается:

- в том, чтобы не делать специальных пробных шагов, а использовать найденные градиенты в предыдущих точках (поскольку они близки к x^k);
- в том, чтобы строить аппроксимацию непосредственно для обратной матрицы $[\nabla^2 f(x^k)]^{-1}$.

Итак, рассмотрим метод:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma_k H_k \nabla f(x^k).$$

Матрицу H_k будем выбирать таким образом, чтобы она в некотором смысле аппроксимировала матрицу $[\nabla^2 f(x^k)]^{-1}$. Заметим, что

$$\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k+1}) = \nabla^2 f(x^{k+1})(x^k - x^{k+1}) + o\left(\left\|x^k - x^{k+1}\right\|\right)$$

Предполагая невырожденной матрицу $\nabla^2 f(x^{k+1})$, отсюда с точностью до членов более высокого порядка малости по сравнению с $\left\|x^k - x^{k+1}\right\|$ получим

$$[\nabla^2 f(x^{k+1})]^{-1} \left(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)\right) \approx x^{k+1} - x^k$$

При этом, если $f(x) = (Ax, x)/2 + (b, x)$ — квадратичная функция, A — симметрическая положительно определённая матрица, то $\nabla f(x) = Ax + b$, $\nabla^2 f(x) = A$ и приближенное равенство обращается в точное

$$[\nabla^2 f(x^{k+1})]^{-1} \Delta y^k = \Delta x^k,$$

где $\Delta x^k = x^{k+1} - x^k$, $\Delta y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$. Поэтому естественно потребовать, чтобы для матрицы H_{k+1}, приближающей $[\nabla^2 f(x^{k+1})]^{-1}$, выполнялось условие

$$H_{k+1} \Delta y^k = \Delta x^k \tag{5}$$

Это условие носит название квазиньютоновского. Оно лежит в основе целого ряда методов аппроксимации $[\nabla^2 f(x)]^{-1}$. Соответствующие методы минимизации, для которых на каждом шаге выполняется квазиньютоновское условие, также называются квазиньютоновскими.

Кроме того, удобно получать H_{k+1} как поправку к H_k с помощью матриц первого или второго ранга. Наконец, эти поправки должны быть такими, чтобы для квадратичного случая оказалось $H_k = A^{-1}$. Пусть

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k.$$

Матрица ΔH_k, обеспечивающая выполнение (5) определяется неоднозначно и возникает семейство методов.

В качестве H_0 можно выбрать любую положительно определённую симметрическую матрицу. На практике часто выбирается единичная матрица.

Метод Давидона—Флетчера—Пауэлла (DFP):

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\Delta x_k \, \Delta x_k^\mathsf{T}}{\Delta x_k^\mathsf{T} \, \Delta y_k} - \frac{H_k \, \Delta y_k \, \Delta y_k^\mathsf{T} \, H_k}{\Delta y_k^\mathsf{T} \, H_k \, \Delta y_k}$$

Метод Бройдена:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \, \Delta y_k) \Delta x_k^\mathsf{T} \, H_k}{\Delta x_k^\mathsf{T} \, H_k \, \Delta y_k}$$

Симметричная формула ранга 1 (SR1):

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\Delta x_k - H_k \, \Delta y_k)(\Delta x_k - H_k \, \Delta y_k)^\mathsf{T}}{(\Delta x_k - H_k \, \Delta y_k)^\mathsf{T} \, \Delta y_k}$$

Метод Бройдена—Флетчера—Гольдфарба—Шанно (BFGS):

$$H_{k+1} = \left(I - \frac{\Delta x_k \, \Delta y_k^\intercal}{\Delta y_k^\intercal \, \Delta x_k}\right) H_k \left(I - \frac{\Delta y_k \, \Delta x_k^\intercal}{\Delta y_k^\intercal \, \Delta x_k}\right) + \frac{\Delta x_k \, \Delta x_k^\intercal}{\Delta y_k^\intercal \, \Delta x_k}$$

или

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\Delta x_k^\intercal \, \Delta y_k + \Delta y_k^\intercal \, H_k \, \Delta y_k)(\Delta x_k \, \Delta x_k^\intercal)}{(\Delta x_k^\intercal \, \Delta y_k)^2} - \\ - \frac{H_k \, \Delta y_k \, \Delta x_k^\intercal + \Delta x_k \, \Delta y_k^\intercal \, H_k}{\Delta x_k^\intercal \, \Delta y_k}$$

BFGS — один из наиболее широко применяемых квазиньютоновских методов.

Для квадратичной функции любой квазиньютоновский метод находит минимум за конечное число итераций. Для неквадратичных функций квазиньютоновские методы, естественно, применимы, но перестают быть конечными. В связи с этим при $k > n$ можно либо продолжать счёт по этим же формулам, либо ввести процедуру обновления (заменять матрицу H_k на H_0 через каждые n итераций).

Квазиньютоновские методы чрезвычайно популярны, это объясняется упоминавшимися выше достоинствами методов — они требуют лишь одного вычисления градиента на каждом шаге, в них не нужно обращать матрицу или решать систему линейных уравнений, они обладают глобальной сходимостью, в окрестности решения скорость сходимости высока (часто квадратична) и т. п.

При численной проверке методов обычно наилучшие результаты даёт метод BFGS.

Алгоритм.

1. Задать точность вычислений $\varepsilon > 0$, выбрать начальное приближение x^0 и матрицу $H_0 \coloneqq I$.

2. Положить $k \coloneqq 0$.

3. Определить направление поиска $d^k \coloneqq -H_k \nabla f(x^k)$.

4. Вычислить значение шага $\gamma_k \coloneqq \arg\min\limits_{\gamma \geqslant 0} f(x^k + \gamma d^k)$.

5. Вычислить точку $x^{k+1} \coloneqq x^k + \gamma_k d^k$ и градиент $\nabla f(x^{k+1})$.

6. Проверить критерий окончания поиска $\left\|\nabla f(x^{k+1})\right\| < \varepsilon$. Если критерий выполнен, перейти к п. 8.

7. Вычислить $\Delta x^k \coloneqq x^{k+1} - x^k = \gamma_k d^k$, $\Delta y^k \coloneqq \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$. Вычислить матрицу H_{k+1} по формуле для выбранного метода. Положить $k \coloneqq k + 1$ и перейти к п. 3.

8. Выбрать приближённо $x^* \coloneqq x^{k+1}$, $f(x^*) \coloneqq f(x^{k+1})$. Поиск завершён.

Вопросы?