Методы оптимизации

Оптимизация – выбор наилучшего решения.

Сложность или невозможность отыскания аналитического решения привело к тому, что постепенно стало ясно, что любая задача может считаться решенной, если *указан алгоритм, позволяющий численно построить приближенное решение с требуемой точностью*.

Математическая теория оптимизации включает в себя фундаментальные результаты и численные методы, позволяющие находить наилучший вариант из множества возможных альтернатив *без их полного перебора* и сравнения.

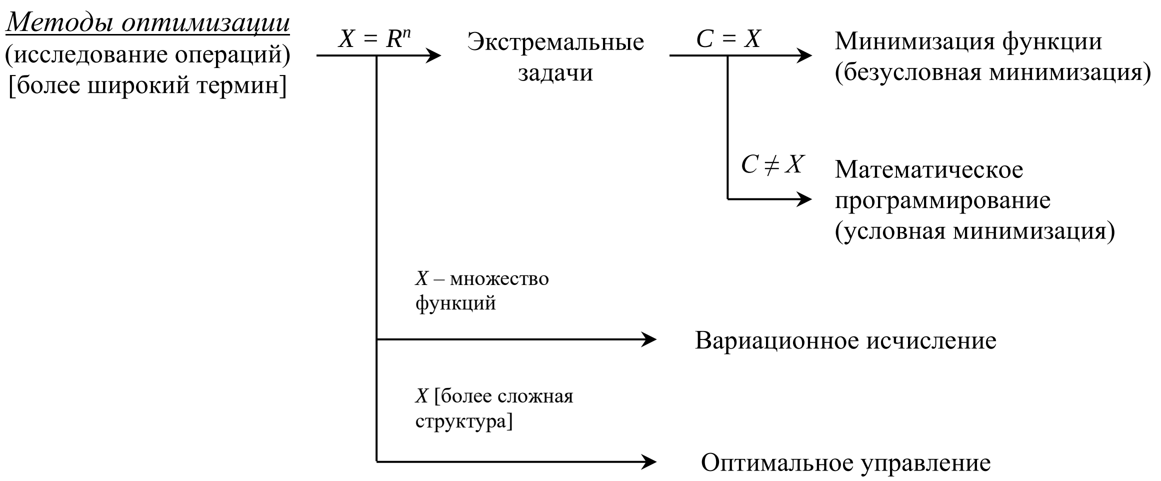
Итак, есть варианты решения задачи, среди которых надо найти лучший. Как оценить какой метод лучше? Надо определить критерий качества.

Критерий качества – функционал, действующий из множества вариантов решения задачи в множества вещественных чисел. Тогда понятие хуже - лучше тождественно больше - меньше. Один вариант лучше другого, если, например, значение функционала меньше, и неопределенность теряется.

У одной и той же задачи часто бывает возможным наличие нескольких функционалов качества. При этом нахождение их экстремума оказывается сложным, и выбраться из этой ситуации можно за счет методов многокритериальной оптимизации.
В этом курсе мы будем заниматься поиском экстремума одного функционала.

Итак, рассмотрим *функционал* $\varphi: X \to \overline{R}$, где
X – множество вариантов или допустимое множество (область определения функционала);
$\overline{R} = R \cup \{-\infty\} \cup \{+\infty\}$ – расширенная вещественная прямая.
Пусть $c \subset X$ – некоторое подмножество X**.**
Задача: $\varphi(x) \to \min(\max), x \in c$ называется *экстремальной задачей с ограничением* c.
(экстремум – максимум или минимум)

Терминология и классификация



Этапы решения оптимизационной задачи

Процесс принятия решения в исследовании операций представляет собой сложный процесс, который условно можно разбить на 4 этапа:

1 этап: Построение качественной модели рассматриваемой проблемы, т.е. выделение факторов, которые представляются наиболее важными, установление закономерностей, которым они подчиняются.

2 этап: Построение математической модели, включающей в себя выбор функционала φ (или целевой функции переменных), $\varphi(x) \to \min(\max)$, формирование ограничений (условий) в виде равенств или неравенств, например

$$X = \left\{ x : f_i(x) \le a_i, ..., f_m(x) \le a_m \right\}.$$

Этот этап требует привлечения математических знаний и характеризуется, как правило, большим количеством переменных (n и m – велики).

3 этап: Решение математической задачи – выбор метода, реализация его и получение результата (применение ЭВМ, разработка программ, применение существующих СП и т.д.).

4 этап: Анализ полученного результата. Выясняется степень адекватности модели (результаты вычислений) и моделируемого объекта (имитационные данные).

Примеры математических моделей

Вообще, теория математических моделей является предметом специализированного курса и требует знаний в той области, которой принадлежит моделируемый объект. Рассмотрим традиционные примеры, иллюстрирующие применение метода математического моделирования в задачах экономического содержания.

Задача о рационе: Пусть имеется n – число продуктов питания и m – число питательных веществ.

Пусть a_{ij} – содержание j-го вещества в единице i-го продукта;

b_j – минимальная (суточная) потребность (человека) в j-ом веществе;

c_i – стоимость единицы i-го продукта;

x_i – искомое количество (суточное потребление) i-го продукта.

Тогда $\sum_{i=1}^{n} a_{ij} x_i$ – общее содержание j-го питательного вещества;

$\sum_{i=1}^{n} c_i x_i$ – стоимость (суточного) рациона.

Задача: найти min $\sum_{i=1}^{n} c_i x_i$ (или тот набор, $(x_1,\ldots,x_n)$ при котором достигается минимум) при условии, что $\sum_{i=1}^{n} a_{ij} x_i \ge b_j,\ j=1,...,m,\ x_i \ge 0, i=1,...,n$	Типичная задача линейного программирования

Транспортная задача: Требуется составить план перевозок однородного груза таким образом, чтобы общая стоимость перевозок была минимальной.

Пусть a_i – количество единиц груза в i-ом пункте отправления ($i=1,...,m$);

b_j – потребность в j-ом пункте назначения ($j=1,...,n$) в единицах груза;

c_{ij} – стоимость перевозки единицы груза из i-го пункта в j-ый;

x_{ij} – планируемое количество единиц груза для перевозки из i-го пункта в j-ый.

Тогда $\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_{ij}$ – общая (суммарная) стоимость перевозок;

$\sum_{j=1}^{n} x_{ij}$ – количество груза, вывозимого из i-го пункта;

$\sum_{i=1}^{m} x_{ij}$ – количество груза, доставляемого в j-ый пункт.

В простейшем случае должны выполняться следующие очевидные условия:

$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij} = a_i,\ i=\overline{1,m}\ ;\ \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_j,\ j=\overline{1,n}\ ;\ \sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{j=1}^{n} b_j\ .$$

Таким образом, математическая формулировка транспортной задачи имеет вид:

Найти:

$$\min \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_{ij}\ ,$$

при условиях

$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij} = a_i\ ;\ \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_j\ ;\ x_{ij} \ge 0,\ i=\overline{1,m},\ j=\overline{1,n}.$$

Задача носит название *замкнутой транспортной модели*, а условие $\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{j=1}^{n} b_j$ является естественным условием разрешимости замкнутой транспортной задачи.

Обозначения и определения

R^n – n-мерное евклидово пространство.

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$ – вектор столбец в R^n;

$x^T = (x_1, x_2, ..., x_n)$ – вектор-строка в R^n;

$(x, y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$ – скалярное произведение, $x, y \in R^n$;

$\|x\| = \sqrt{(x, x)}$ – евклидова норма вектора в R^n;

$A - m \times n$ – матрица, $A^T - n \times m$ – транспортированная матрица;

$Ax \in R^m$ – произведение матрицы ($m \times n$) на вектор ($n \times 1$);

$\varphi(x)$, $f(x)$, $g(x)$,… – как правило, вещественные (скалярные) функции, т.е. φ: $R^n \to R$;

$$\varphi'(x^0) = grad\ \varphi(x^0) = \left.\begin{pmatrix} \frac{\partial\varphi}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial\varphi}{\partial x_n} \end{pmatrix}\right|_{X=X^0}$$ – градиент функции φ в точке x^0 (n-мерный вектор);

$$\varphi''(x^0) = H(x^0) = \left.\begin{pmatrix} \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}\right|_{X=X^0}$$ – матрица Гессе (матрица вторых производных) функции φ в точке x^0;

Т.к. $\partial^2\varphi \big| \partial x_i \partial x_j = \partial^2\varphi \big| \partial x_j \partial x_i$, то $H(x^0)$ – есть вещественная симметричная матрица.

Определение. Множество $X \subset R^n$ называется *выпуклым*, если для $\forall x^1, x^2 \in X$, $\forall \lambda \in [0,1]$ $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2 \in X$. Иными словами, множество X выпукло, если оно вместе с любыми своими двумя точками x^1 и x^2 содержит соединяющий их отрезок.

Выпуклое множество Невыпуклое множество

Примеры.

На числовой прямой R выпуклыми множествами являются всевозможные промежутки, т.е.:

- одноточечные множества;
- интервалы;
- полуинтервалы;
- отрезки;
- полупрямые;
- сама прямая.

В пространстве R^n примерами выпуклых множеств служат:

- само подпространство;
- любое его линейное подпространство;
- одноточечное множество;
- шар;
- отрезок,
- а также следующие множества:

  $l_{x^0 h} = \left\{ x \in R^n \middle| x = x^0 + \alpha h, \alpha \in R \right\}$ – прямая, проходящая через $(\cdot)$ x^0 в направлении вектора h.

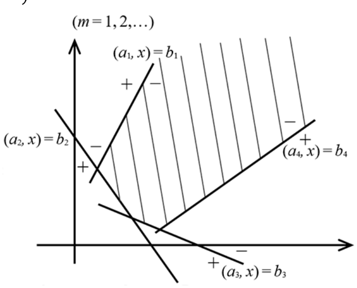
  $l^+_{x^0 h} = \left\{ x \in R^n \middle| x = x^0 + \alpha h, \alpha \geq 0 \right\}$ – луч, выходящий из $(\cdot)$ x^0 в направлении h.

  $H_{p\beta} = \left\{ x \in R^n \middle| (p, x) = \beta \right\}$ – гиперпространство с нормалью p.

  $H^+_{p\beta} = \left\{ x \in R^n \middle| (p, x) \geq \beta \right\}, H^-_{p\beta} = \left\{ x \in R^n \middle| (p, x) \leq \beta \right\}$ – порождаемые ею полупространства.

Все перечисленные множества в R^n, кроме шара, являются частными случаями *выпуклого множества вида*:

$$X = \left\{ x \in R^n \middle| Ax \leq b \right\} = \left\{ x \in R^n \middle| (a_i, x) \leq b_i, i = 1, ..., m \right\},$$



где A – некоторая матрица размера $m \times n$ со строками $a_1, ..., a_m$, $b \subset R^m$ – вектор.

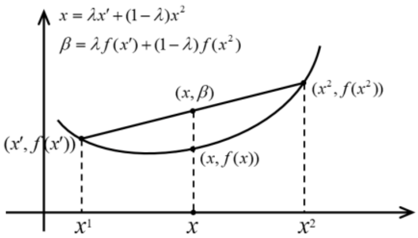
Множества такого вида называют *полиэдральными* или *полиэдрами*. Таким образом, полиэдр – множество решений некоторой системы конечного числа линейных неравенств (пересечение конечного числа полупространств).

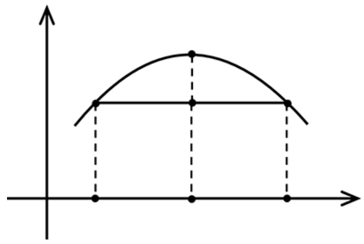
Определение. Функция f, определенная на выпуклом множестве $X \subset R^n$, называется *выпуклой на X*, если

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \le \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2),$$

при $\forall x^1, x^2 \in X$, $\lambda \in [0,1]$.

Если для любых $x^1, x^2, x^1 \ne x^2, \lambda \in [0,1]$ неравенство выполняется как строгое, то f называется строго выпуклой на X. Функция называется (строго) вогнутой, если функция $-f$ (строго) выпукла.





Функцию $f(x) = (a, x) + b$, где $a \in R^n$, $b \in R$ будем называть линейной. Ясно, что для неё исходное неравенство выполняется как равенство. Поэтому она выпукла и вогнута одновременно, но не строго.

<u>Минимизация функций</u>

Сама по себе постановка задачи оптимизации проста и естественна: заданы множество X и функция $\varphi(x)$, определенная на X, требуется найти точку минимума или максимума функции φ на X.

Условимся записывать задачу на минимум в виде

$\varphi(x) \to \min, x \in X$, где

φ – *целевая функция*; X – *допустимое множество*.

Условимся также, что в дальнейшем будем рассматривать задачу на min, поскольку задача

$\min \varphi(x) \Leftrightarrow \max(-\varphi(x))$.

Если допустимое множество $X = R^n$, то задача называется *безусловной* минимизацией, иначе, когда $X \ne R^n$ – задача *условной* минимизации.

Отметим, что само понятие точки минимума неоднозначно и требует уточнения.

Определение. Точка $x^* \in X$ называется:

1) точкой глобального минимума функции φ на множестве X, или глобальным решением задачи, если $\forall x \in X$ $\varphi(x) \ge \varphi(x^*)$;

2) точкой локального минимума φ на X, или локальным решением задачи, если существует

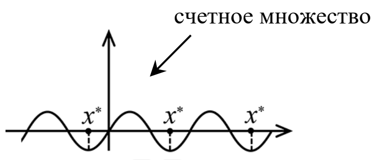
$$\delta > 0 : \forall x \in X, \left\| x - x^* \right\| < \delta \Rightarrow \varphi(x) \geq \varphi(x^*)$$

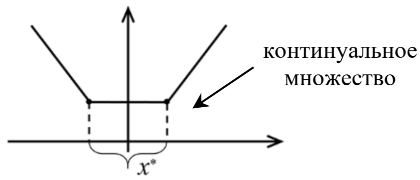
(Если $\Delta = \left\{ x : \left\| x - x^* \right\| < \delta \right\}$ – δ-окрестность $(\cdot)$ x^* и x^* – локальный min, то x^* – глобальный min в области $X \cap \Delta$).

Если неравенства в 1) и 2) выполняются как строгие, то говорят, что x^* – точка строгого min в глобальном или локальном смысле.

Ясно, что глобальное решение является локальным, обратное – не верно.

Пример. Глобальных min может быть много:





Для записи того факта, что x^* является точкой глобального min функции φ на X используем запись:

$$\varphi^* = \varphi(x^*) = \min_{x \in X} \varphi(x)$$

или эквивалентная ей запись:

$$\varphi^* = \arg\min_{x \in X} \varphi(x) \text{ – } \textit{оптимальная} \text{ точка.}$$

Множество всех точек глобального min φ на X обозначим:

$$\operatorname{Arg}\min_{x \in X} \varphi(x) = \left\{ x^* \in X \middle| \varphi(x^*) = \varphi^* \right\}$$

Таким образом, $\arg\min\limits_{x \in X} \varphi(x)$ – это произвольная точка из множества $\operatorname{Arg}\min\limits_{x \in X} \varphi(x)$.

В дальнейшем мы часто будем прибегать к геометрической интерпретации задач оптимизации, основанной на понятии линий (или поверхностей) уровня функции φ, т.е. множеств вида:

$L_\alpha = \left\{ x \in R^n : \varphi(x) = \alpha \right\}$ - такое множество носит название *поверхность уровня* α.

Напомним известный факт из анализа: если функция φ дифференцируема в точке x, то градиент $\varphi'(x)$ ортогонален к проходящей через x линии уровня α и направлен (если $f'(x) \neq 0$) в сторону возрастания функции φ, т.е. поверхность L_α делит R^n на два подпространства:

$\left\{ x : \varphi(x) > \alpha \right\}(+)$ и $\left\{ x : \varphi(x) < \alpha \right\}(-)$.

Задача поиска оптимальной точки может быть сформулирована следующим образом: найти $\alpha^* = \min\alpha$ среди тех α, для которых $L_\alpha \cap X \neq \varnothing$. Тогда любая точка $x \in L_{\alpha^*}$ является оптимальной точкой.

Возможны два случая:

- x^* лежит внутри X – рис. 1;
- x^* лежит на границе X – рис. 2.

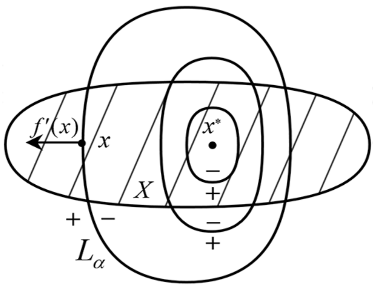


Рис.1

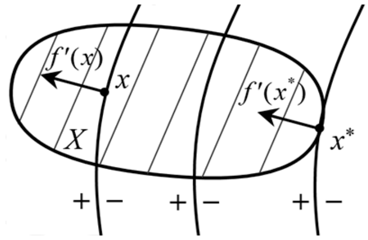


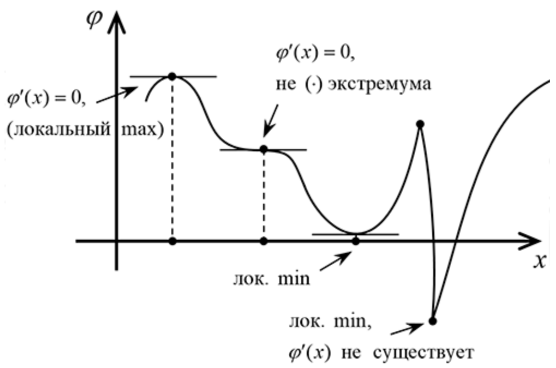
Рис.2

При изучении задач оптимизации в первую очередь возникает вопрос о существовании решения. Напомним в этой связи некоторые результаты из *математического анализа*.

Теорема 1 (Вейерштрасса). Если X – компакт в R^n (т.е. замкнутое ограниченное множество), а φ – непрерывная функция на X, то существует $x^* \in X$: x^* – глобальный минимум φ на X, т.е. *глобальное решение задачи* $\varphi(x) \to \min, x \in X$ *существует*!

Теорема 2 (необходимые условия локального минимума). Если φ – дифференцируема в точке $x^* \in X$ и x^* – локальный минимум, то $\varphi'(x^*) = 0$ (градиент равен нулю).

Определение. Точка $\hat{x} \in X$ в $\varphi'(\hat{x}) = 0$, называется *стационарной* (обратное не верно).



Теорема 3 (достаточное условие локального минимума).

Если φ дважды дифференцируема в точке $x^* \in R^n$ и выполняется:

1) $\varphi(x^*) = 0$;

2) матрица Гессе $\varphi''(x^*)$ положительно определена,

то x^* – (строгий) локальный минимум функции φ.

Определение. Матрица H называется *положительно определенной*, если $\forall h \in R^n, (Hh, h) > 0, h \neq 0$.

Критерий Сильвестра: H положительно определена $\Leftrightarrow$ ее главные миноры положительны.

Приведем несколько теорем для выпуклых задач.

Определение. Задача минимизации $\varphi(x) \to \min, x \in X$ называется выпуклой, если X – выпуклое множество, φ – выпуклая функция на X.

Справедливы следующие теоремы:

Теорема 4. Если задача минимизации $\varphi(x) \to \min, x \in X$ выпукла, то любое её локальное решение является также глобальным.

Доказательство. Пусть x^* – локальное решение задачи, т.е. при некотором $\varepsilon > 0$ выполняется условие:

$$\varphi(x^*) \le \varphi(x) \text{ при } \forall x \in X \cap U_\varepsilon(x^*),$$

где $U_\varepsilon(x^*) = \left\{ x \in R^n \middle| \left\| x - x^* \right\| \le \varepsilon \right\}$ – шар радиуса $\varepsilon > 0$ с центром в x^*.

Для любых точек $x \in X : x \ne x^*$, положим $\lambda = \min\left(\dfrac{\varepsilon}{\left\| x - x^* \right\|}, 1 \right)$.

Тогда $\lambda x + (1-\lambda)x^* \in X \cap U_\varepsilon(x^*)$. Покажем это.

1. Пусть $\lambda = 1 \Rightarrow \left\| \lambda x + (1-\lambda)x^* - x^* \right\| = \left\| x - x^* \right\|$,

   Если $\lambda = 1 \Rightarrow \dfrac{\varepsilon}{\left\| x - x^* \right\|} > 1 \Rightarrow \left\| x - x^* \right\| < \varepsilon \Rightarrow$ точка $\lambda x + (1-\lambda)x^* \in U_\varepsilon(x^*)$

2. Пусть $\lambda = \dfrac{\varepsilon}{\left\| x - x^* \right\|}$

$$\Rightarrow \left\| \lambda x + (1-\lambda)x^* - x^* \right\| = \left\| \frac{\varepsilon}{\left\| x - x^* \right\|} \cdot x + \left(1 - \frac{\varepsilon}{\left\| x - x^* \right\|} \right) \cdot x^* - x^* \right\| = \left\| \frac{\varepsilon x}{\left\| x - x^* \right\|} - \frac{\varepsilon x^*}{\left\| x - x^* \right\|} \right\| = \varepsilon$$

$\Rightarrow$ точка $\lambda x + (1-\lambda)x^* \in U_\varepsilon(x^*)$

и, следовательно,

$$\varphi(x^*) \le \varphi\left(\lambda x + (1-\lambda)x^* \right) \le \lambda\varphi(x) + (1-\lambda)\varphi(x^*) \Rightarrow \varphi(x^*) \le \varphi(x),$$

т.е. x^* – глобальное решение задачи, *ч.т.д.*

Таким образом, *для выпуклых задач* понятия *локального и глобального решений не различаются*.

Второе свойство выпуклых задач можно высказать в виде следующего общего принципа: *необходимые условия оптимальности* в том или ином классе задач минимизации при соответствующих предположениях выпуклости *оказываются и достаточным*.

Теорема 5. Пусть функция φ выпукла на R^n и дифференцируема в точке $x^*\in R^n$. Если $\varphi'(x^*) = 0$, то x^* – точка минимума функции на R^n, т.е. решение задачи минимизации $\varphi(x) \to \min, x \in X$.

Доказательство. Для $\forall x\in X$, $\lambda\in[0,1]$ имеем

$$\varphi(\lambda x + (1-\lambda)x^*) \le \lambda\varphi(x) + (1-\lambda)\varphi(x^*) .$$

Преобразуя эту формулу и, пользуясь дифференцируемостью функции φ в точке x^*, получаем:

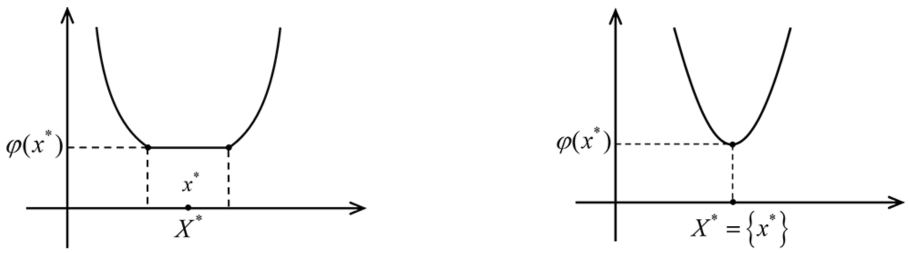
$$\varphi(x) - \varphi(x^*) \ge \frac{\varphi(x^* + \lambda(x-x^*)) - \varphi(x^*)}{\lambda} = \frac{(\varphi'(x^*), \lambda(x-x^*)) + o(\lambda)}{\lambda} = \frac{o(\lambda)}{\lambda};$$

Отсюда предельным переходом при $\lambda \to 0$ выводим, что $\varphi(x) \ge \varphi(x^*)$, *ч.т.д.* (т.е. для $\forall x\in X$ $\varphi(x) \ge \varphi(x^*)$).

Полученные свойства выпуклых задач имеют важное значение не только в теории, но и в численных методах оптимизации. Дело в том, что большинство существующих численных методов позволяет, вообще говоря, находить лишь локальные решения, а точнее – стационарные точки задачи. Теоремы 4 и 5 говорят о том, что для выпуклой задачи *отыскание стационарной точки* автоматически означает *отыскание решения, причем глобального*.

Укажем ещё одно полезное свойство выпуклых задач.

Теорема 6. Пусть задача минимизации $\varphi(x) \to \min, x \in X$ выпукла и имеет решение. Тогда множество её решений $X^* = Arg\min\varphi(x)$ выпукло. Если при этом $\varphi(x)$ строго выпукла на X, то решение единственно, т.е. X^* состоит из одной точки.



Доказательство:

1. Пусть $x^1, x^2 \in X^*$, $\lambda \in [0,1] \Rightarrow \varphi(x^1) = \varphi(x^2) = \varphi(x^*) = \varphi^*$

При этом

$$\varphi(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \le \lambda\varphi(x^1) + (1-\lambda)\varphi(x^2) = \varphi^* \qquad (*)$$

По определению X^* неравенство может выполняться только как равенство, поскольку $\varphi^* - \min$

$$\Rightarrow \lambda x' + (1-\lambda)x^2 \in X^*, \text{ т.е. } X^* - \text{выпукло.}$$

2. Пусть φ – строго выпукла. Если предположить, что в X^* существуют две различные точки x^1 и x^2, то при $\lambda \in [0,1]$ неравенство (*) должно быть строгим, что невозможно, т.к. φ^* – min и получается < min.

Трудности:

1. В случаях, когда функция φ достаточно проста, теоремы 1-3 помогают решить задачу минимизации даже в явном виде. Однако зачастую задача поиска стационарных точек является нетривиальной. А затем – перебор стационарных точек в поисках точки локального минимума, затем – перебор локальных экстремумов в поисках глобального экстремума.
2. Для задач условной минимизации теоремы 1-3 применимы в случае, когда локальное решение x^* – внутренняя точка допустимого множества X. Если же экстремум достигается в угловых точках границы множества условий, то нарушается дифференцируемость $\Rightarrow$ неприменимость методов классического анализа.

Т.о., в большинстве случаев задачу $\min\varphi(x)$ приходится *решать численно с применением ЭВМ и специальных методов минимизации*.

Безусловная минимизация функции

Методы оптимизации функций в R^n делятся на:

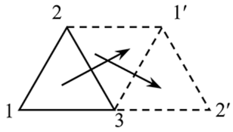
- локальные методы (поиск локального min, т.е. такой точки x^*, что существует $\delta > 0$, $\forall x \in X : \left\{\left\|x - x^*\right\| \le \delta\right\} \Rightarrow \varphi(x^*) \le \varphi(x)$);
- нелокальные (или прямые) методы (поиск глобального min для ограничений снизу функции $\varphi(x)$, т.е. если α^* – нижняя грань, то поиск такой точки x^*: $\varphi(x^*) = \alpha^*$). Для этих методов не требуется аналитического задания функции, надо только уметь вычислять ее значение в любой точке. Обычно – для функций сложной структуры.

<u>Нелокальные методы</u> сводятся к уменьшению области, внутри которой находится оптимальная точка. Пример нелокального метода – *симплексный метод*.

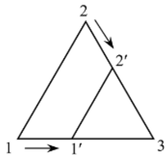
Определение. *Симплекс* – выпуклое тело в R^n, состоящее из $(n + 1)$ равноудаленных точек – вершин симплекса, отрезок их соединяющий – ребро симплекса, в R^2 – треугольник, в R^3 – тетраэдр.

Неформальное описание симплексного метода: состоит из двух процедур – отражение и сжатие.

– *отражение*: симметричное отражение вершины с наибольшим значением $\varphi(x)$ относительно противоположной грани ["перекатывание симплекса"]. Если $\varphi(x_i') > \varphi(x_i)$, то выбирается другая $(i + 1)$-я вершина.



Когда зацикливание (все $(n + 1)$-вершины перебрали), то



– *сжатие*: уменьшение размеров симплекса при сохранении вершины с наименьшим значением $\varphi(x)$, затем переход к отражению, и так далее, пока ребро симплекса не станет меньше некоторого числа: $\|x_i - x_j\| < \varepsilon$.

Достоинства: с большой вероятностью метод не распознает локальный минимум ("не остановится").

<u>*Локальные* методы</u> основаны на построении *релаксационной* последовательности $\{x_i\}$ такой, что $\varphi(x_i) \ge \varphi(x_{i+1})$ и $x_i \xrightarrow[i\to\infty]{} x^* = \arg\min \varphi(x)$.

Поэтому *релаксационные* методы называют также *методами спуска*.

Классификация релаксационных методов

С одной стороны,

- *одношаговые* методы: $x_{i+1}(x_i)$ – каждый шаг $(i + 1)$ зависит только от предыдущей точки x_i и значения функции $\varphi(x_i)$;
- *двухшаговые* методы: $x_{i+1}(x_i, x_{i-1})$ – зависимость от двух предыдущих точек;
- *и т.д.;*

С другой стороны,

- *методы нулевого порядка:* если используются только значения минимизируемой функции $\varphi(x)$;
- *методы первого порядка*: если используются только значение $\varphi(x)$ и $\varphi'(x)$;
- *методы второго порядка*: если используются значения $\varphi(x)$, $\varphi'(x)$ и $\varphi''(x)$;
- *etc;*

Градиентные методы (методы первого порядка)

Итак, будем рассматривать задачу:

$$\varphi(x) \to \min, x \in X \equiv R^n \text{ (безусловная минимизация),}$$

предполагая, что функция $\varphi(x)$ непрерывно дифференцируема на R^n, т.е. $\varphi(x) \in C^1(R^n)$. По определению дифференцируемой функции

$$\varphi(x+h) - \varphi(x) = \left(\varphi'(x), h\right) + o(h), \tag{1}$$

где $\lim\limits_{|h| \to 0} o(h)\|h\|^{-1} = 0$.

Если $\varphi'(x) \neq 0$, то при достаточно малых $\|h\|$ главная часть приращения для φ будет определяться дифференциалом функции $d\varphi(x) = (\varphi'(x)h)$. Оценим величину $d\varphi(x)$ Справедливо неравенство Коши-Буняковского:

$$-\|\varphi'(x)\| \cdot \|h\| \leq \left(\varphi'(x), h\right) \leq \|\varphi'(x)\| \cdot \|h\|,$$

причем, если $\varphi'(x) \neq 0$, то правое неравенство превращается в равенство, только при $h = -\alpha\varphi'(x)$, а левое только при $h = \alpha\varphi'(x)$, где $\alpha = const \geq 0$.

Отсюда ясно, что при $\varphi'(x) \neq 0$ *направление наибыстрейшего возрастания* функции $\varphi(x)$ в точке x совпадает с *направлением градиента* $\varphi(x)$, а направление наибыстрейшего убывания – с направлением антиградиента $-\varphi'(x)$.

Это свойство градиента лежит в основе ряда итерационных методов минимизации функций. Один из таких – *градиентный*. Он предполагает, как, впрочем, и все остальные итерационные методы, наличие априорной точки начального приближения.

Предположим, что начальная точка x_0 уже выбрана, тогда градиентный метод заключается в построении последовательности $\{x_k\}$ по правилу:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \varphi'(x_k),\ \alpha_k > 0,\ k = 0,1,... \tag{2}$$

α_k – величина шага, x_k – направление спуска.

Если $\varphi'(x_k) \neq 0$, то шаг $\alpha_k > 0$ можно выбрать так, чтобы получить релаксационную последовательность: $\varphi(x_{k+1}) < \varphi(x_k)$. Действительно, подставляя (2) в (1), имеем:

$$\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x_k) = \alpha_k \left[-\|\varphi'(x_k)\|^2 + o(\alpha_k) \cdot \alpha_k^{-1}\right] < 0,$$

при всех достаточно малых $\alpha_k > 0$.

Если $\varphi'(x_k) = 0$, то x_k – стационарная точка. В этом случае процесс (2) прекращается и проводятся дополнительные исследования поведения функции в окрестности точки x_k для выяснения того, достигается ли в точке x_k минимум функции $\varphi(x)$ или не достигается.

Существуют различные *способы выбора величины шага* α_k в методе (2). В зависимости от способа выбора α_k можно получить различные варианты градиентного метода.

Метод наискорейшего спуска

На луче $\left\{x \in R^n : x = x_k - \alpha\varphi'(x_k),\ \alpha \ge 0\right\}$, направленном по антиградиенту, введем функцию одной переменной

$$\psi(\alpha) = \varphi\left(x_k - \alpha\varphi'(x_k)\right),\ \alpha \ge 0$$

и определим α_k из условий

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha\ge 0} \varphi\left(x_k - \alpha\varphi'(x_k)\right).$$

Другими словами α_k выбирается так, чтобы $\varphi(x_{k+1})$ в заданном направлении была наименьшей для чего на любом шаге необходимо решать задачу одномерной минимизации функции $\psi(\alpha)$, например, с помощью $\psi'(\alpha) = 0$.

Пример. Рассмотрим задачу

$$\varphi(x) = x_1^2 + 2x_2^2 \to \min$$

с начальной точкой $x^0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \varphi(x^0) = 6$.

Из общих соображений ясно, что $\varphi_{\min} = 0$ при $x^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

1-й шаг:

$$\varphi'(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 4x_2 \end{pmatrix};\ \varphi'(x^0) = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Ищем

$$x^1 = x^0 - \alpha\varphi'(x^0) = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \alpha\begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-4\alpha \\ 1-4\alpha \end{pmatrix}.$$

Функция $\psi(\alpha)$ имеет следующий вид:

$$\psi(\alpha) = \varphi(x^1) = (2-4\alpha)^2 + 2(1-4\alpha)^2.$$

Решаем уравнение $\psi'(\alpha) = 0$, т.е.

$$2(2-4\alpha)\cdot(-4) + 4(1-4\alpha)\cdot(-4) = 0;$$

$$4 - 8\alpha + 4 - 16\alpha = 0;\ \Rightarrow\ 24\alpha = 8\ \Rightarrow\ \alpha = \frac{1}{3};\ \Rightarrow\ x^1 = \begin{pmatrix} 2-\dfrac{4}{3} \\ 1-\dfrac{4}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{2}{3} \\ -\dfrac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

2-й шаг:

$$\varphi'(x^1) = \begin{pmatrix} \dfrac{4}{3} \\ -\dfrac{4}{3} \end{pmatrix}; x^2 = x^1 - \alpha\varphi'(x^1) = \begin{pmatrix} \dfrac{2}{3} \\ -\dfrac{1}{3} \end{pmatrix} - \alpha\begin{pmatrix} \dfrac{4}{3} \\ -\dfrac{4}{3} \end{pmatrix};$$

$$\psi(\alpha)=\varphi(x^2)=\left(\frac{2}{3}-\frac{4}{3}\alpha\right)^2+2\left(-\frac{1}{3}+\frac{4}{3}\alpha\right)^2.$$

Решаем уравнение $\psi'(\alpha)=0\ \Rightarrow$

$$2\left(\frac{2}{3}-\frac{4}{3}\alpha\right)\cdot\left(-\frac{4}{3}\right)+4\left(\frac{4}{3}\alpha-\frac{1}{3}\right)\cdot\left(\frac{4}{3}\right)=0\,;\Rightarrow$$

$$-\frac{4}{3}+\frac{8}{3}\alpha+\frac{16}{3}\alpha-\frac{4}{3}=0;\ \Rightarrow\ \frac{24}{3}\alpha=\frac{8}{3};\ \Rightarrow\ \alpha=\frac{1}{3};\ x^2=\begin{pmatrix}\frac{2}{3}-\frac{4}{9}\\ -\frac{1}{3}+\frac{4}{9}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{2}{9}\\ \frac{1}{9}\end{pmatrix}.$$

3-й шаг:

$$\varphi'(x^2)=\begin{pmatrix}\frac{4}{9}\\ \frac{4}{9}\end{pmatrix};\ x^3=x^2-\alpha\varphi'(x^2)=\begin{pmatrix}\frac{2}{9}-\alpha\cdot\frac{4}{9}\\ \frac{1}{9}-\alpha\cdot\frac{4}{9}\end{pmatrix}$$

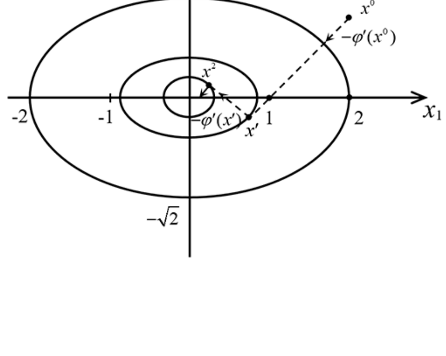
$$\psi(\alpha)=\varphi(x^3)=\left(\frac{2}{9}-\frac{4}{9}\alpha\right)^2+2\left(\frac{1}{9}-\frac{4}{9}\alpha\right)^2$$

Решаем уравнение $\psi'(\alpha)=0\ \Rightarrow$

$$2\left(\frac{2}{9}-\frac{4}{9}\alpha\right)\cdot\left(-\frac{4}{9}\right)+4\left(\frac{1}{9}-\frac{4}{9}\alpha\right)\cdot\left(-\frac{4}{9}\right)=0\,;$$

$$\frac{4}{9}-\frac{8}{9}\alpha+\frac{4}{9}-\frac{16}{9}\alpha=0;\ \Rightarrow\ \frac{8}{9}=\frac{24}{9}\alpha;\ \Rightarrow\ \alpha=\frac{1}{3};\ x^3=\begin{pmatrix}\frac{2}{9}-\frac{4}{27}\\ \frac{1}{9}-\frac{4}{27}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{2}{27}\\ -\frac{1}{27}\end{pmatrix},\text{ и.т.д.}$$

Представим решение задачи графически:



Из графического представления можно сделать вывод, что имеет место:

$\Rightarrow$ а) сходимость к истинной точке минимума $x^*=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$

б) взаимная перпендикулярность градиентов

Свойства метода наискорейшего спуска

1. На любом шаге направление спуска меняется на ортогональное. Действительно, α_k ищется из условия $\psi'(\alpha)=0 \Rightarrow$

$$\left.\frac{\partial\varphi\left(x_k-\alpha\varphi'(x_k)\right)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=\alpha_k}=\left(\varphi'\left(x_k-\alpha_k\varphi'(x_k)\right),-\varphi'(x_k)\right)=-\left(\varphi'(x_{k+1}),\varphi'(x_k)\right)=0$$

2. Точка x_{k+1} лежит на луче, исходящем из точки x_k и касательным к поверхности уровня $L\varphi(x_{k+1})$. Действительно, с одной стороны, несомненно, что $x_{k+1}\in L=\left\{x:\varphi(x)=\varphi(x_{k+1})\right\}$. С другой стороны, градиент $\varphi'(x_{k+1})$ ортогонален касательной к поверхности уровня $L\varphi(x_{k+1})$, поэтому по свойству 1 направление спуска касательно к поверхности $L\varphi(x_{k+1})$.

Иначе. $\varphi'(x_{k+1})$ ортогонален направлению спуска $\Rightarrow$ луч, проходящий из точки x_k – касательной к поверхности $L=\left\{x:\varphi(x)=\varphi(x_{k+1})\right\}$.

Проблемы (общие для релаксационных методов).

а) Имеет ли последовательность $\{x_k\}$ предел в смысле сходимости по норме: существует $\hat{x}?:\lim\limits_{k\to\infty}\|x_k-\hat{x}\|=0$?

б) Является ли этот предел аргументом, составляющим минимум функции φ $\hat{x}=\arg\min\varphi=x^*$?

в) Какова скорость сходимости $\left\|x_k-x^*\right\|$ или $\varphi(x_k)-\varphi(x^*)$?

г) Каковы вычислительные затраты.

Исследование метода наискорейшего спуска для квадратичной функции

Рассмотрим квадратичную функцию

$$\varphi(x)=\frac{1}{2}(Ax,x)-(b,x),$$

где A – симметричная, положительно определенная матрица.

Можно показать, что A – симметричная положительно определенная матрица $\Leftrightarrow$ φ – строго выпукла.

$\varphi'(x)=Ax-b$, т.е. $x^*=A^{-1}\cdot b$ – стационарная точка.

Попробуем записать метод наискорейшего спуска для квадратичной функции. Итак,

$$\psi(\alpha)=\varphi\left(x_k-\alpha\varphi'(x_k)\right),\ \alpha\geq 0$$

$$\psi(\alpha)=\varphi\left(x_k-\alpha(Ax_k-b)\right)=[\ldots]=\varphi(x_k)-\alpha\left(Ax_k-b,Ax_k-b\right)+\frac{\alpha^2}{2}\left(A(Ax_k-b),Ax_k-b\right)$$

(w)

$$\psi'(\alpha) = -\|Ax_k - b\|^2 + \alpha\left(A(Ax_k - b), Ax_k - b\right) = 0 \Rightarrow \alpha_k = \frac{\|Ax_k - b\|^2}{\left(A(Ax_k - b), Ax_k - b\right)} > 0,$$

т.к. A – положительно определена, и значит для нее справедливо: $(Ah, h) > 0$ $\forall h \in R^n \neq 0$.
Для определения скорости сходимости оценим отношение

$$\frac{\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x^*)}{\varphi(x_k) - \varphi(x^*)}$$

Имеем:

$$\varphi(x_{k+1}) = \psi(\alpha_k) = \varphi(x_k) - \frac{\|Ax_k - b\|^4}{\left(A(Ax_k - b), Ax_k - b\right)} + \frac{\|Ax_k - b\|^4}{2\left(A(Ax_k - b), Ax_k - b\right)} = \varphi(x_k) - \frac{\|\varphi'(x_k)\|^4}{2\left(A\varphi'(x_k), \varphi'(x_k)\right)}$$

С другой стороны,

$$\varphi(x_k) - \varphi(x^*) = \frac{1}{2}(Ax_k, x_k) - \frac{1}{2}(Ax^*, x^*) - (b, x_k - x^*) = \frac{1}{2}\left(Ax_k - b, x_k - A^{-1}b\right) = \frac{1}{2}\left(A^{-1}\varphi'(x_k), \varphi'(x_k)\right)$$

Для простоты дальнейших изложений предположим, что матрица A приведена к диагональному виду (т.е. выполнено преобразование координат) так, что $A = diag(\lambda_1, ..., \lambda_n)$, где λ_i – собственные числа матрицы A.

- Собственные числа симметричной положительно определенной матрицы всегда положительны.
- Для симметричной матрицы существует ортогональная матрица ($T^T = T^{-1}$) T такая, что T^TAT – диагональная матрица $\Lambda = diag(\lambda_1, ..., \lambda_n)$.

Если $l = \min \lambda_i, L = \max \lambda_i$, то

$$\left(A\varphi'(x), \varphi'(x)\right) \le L\|\varphi'(x)\|^2$$
$$\left(A^{-1}\varphi'(x), \varphi'(x)\right) \le \frac{1}{l}\|\varphi'(x)\|^2,$$

Тогда

$$\frac{\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x^*)}{\varphi(x_k) - \varphi(x^*)} = 1 - \frac{\|\varphi'(x_k)\|^4}{\left(A\varphi'(x_k), \varphi'(x_k)\left(A^{-1}\varphi'(x_k), \varphi'(x_k)\right)\right)} \le 1 - \frac{l}{L} = \frac{L - l}{L}.$$

Если ввести обозначение $q \overset{def}{=} \frac{L - l}{L} < 1$, то

$$\varphi(x_k) - \varphi(x^*) \le const \cdot q^k$$

Это называется *геометрической скоростью сходимости* (сходимость геометрической прогрессии).
Рассмотрим величину

$$\Delta_k \overset{def}{=} \|x_k - x^*\|.$$

Верхний предел $\overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{\ln \Delta_{k+1}}{\ln \Delta_k}$ называется *порядком сходимости метода*.

В нашем случае квадратичной функции

$$const \cdot q^k \geq \varphi(x_k) - \varphi(x^*) = \frac{1}{2}(Ax_k - b, x_k - x^*) = \frac{1}{2}\left(A(x_k - x^*), x_k - x^*\right) \geq \frac{l}{2}\left\|x_k - x^*\right\|^2.$$

Поэтому

$$\left\|x_k - x^*\right\| \leq const \cdot q^{\frac{k}{2}}$$

$$\Rightarrow \overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{\ln \Delta_{k+1}}{\ln \Delta_k} = \overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{\frac{1}{2}\ln q + \ln \Delta_k}{\ln \Delta_k} = 1$$

$\Rightarrow$ получили сходимость с порядком 1 или *линейную сходимость*. Бывает порядок больше 1 – *сверхлинейная сходимость*.

При исследовании метода наискорейшего спуска для квадратичной функции получили, в частности, следующие результаты:

а) $\varphi(x_k) - \varphi(x^*) \leq const \cdot q^k, q < 1$

б) $\Delta_k \stackrel{def}{=} \left\|x_k - x^*\right\|,\ \ \overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{\ln \Delta_{k+1}}{\ln \Delta_k} = 1$

Определение.

Пусть $\varphi(x_k) \to \varphi(x^*)$ при $k \to \infty$.

Последовательность $\varphi(x_k)$ сходится к $\varphi(x^*)$ *линейно* (с линейной скоростью, со скоростью геометрической прогрессии), если существуют такие константы $q \in (0,1)$ и k_0, что

$$\left\|\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x^*)\right\| \leq q\left\|\varphi(x_k) - \varphi(x^*)\right\|, \text{ при } k \geq k_0.$$

Последовательность $\varphi(x_k)$ сходится к $\varphi(x^*)$ *сверхлинейно*, если

$$\left\|\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x^*)\right\| \leq q_{k+1}\left\|\varphi(x_k) - \varphi(x^*)\right\|, q_k \to 0+, \text{ при } k \to \infty.$$

Последовательность $\varphi(x_k)$ сходится к $\varphi(x^*)$ с *квадратичной скоростью*, если существуют такие константы $c \geq 0$ и k_0, что

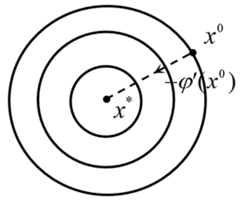
$$\left\|\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x^*)\right\| \leq c\left\|\varphi(x_k) - \varphi(x^*)\right\|^2, \text{ при } k \geq k_0.$$

Вообще, порядок сходимости, равный 1, означает, что значение величины Δ_k убывает, в основном, по закону геометрической прогрессии. Порядок сходимости, равный 2 (квадратичная сходимость) означает, что при достаточно больших k $\Delta_{k+1} \sim \Delta_k^2$. В этом случае, если к тому же Δ_k – малая величина, например, $a \cdot 10^{-p}$ при $0.1 < a < 1$, то Δ_{k+1} равно $a^2 \cdot 10^{-2p}$, т.е. фактически удваивается число нулей после запятой.

Частные случаи:

1) Пусть $l = L$, т.е. матрица $A = LI = lI$ – пропорциональна единичной окружности (линии уровня – окружности).

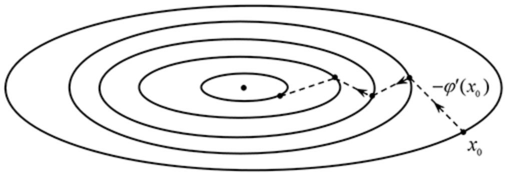
   Тогда:



$$x_{k+1} = x_k - \frac{\|lx_k - b\|^2}{l\|lx_k - b\|^2}(lx_k - b) = \frac{b}{l} = x^*$$

   $\Rightarrow f(x_{k+1}) = f(x^*)$ метод сходится за один шаг.

2) $l \le L$: сходимость может быть еле заметной (q ~ 1), а графически это означает, что линии уровня функции сильно вытянуты и функция имеет так называемый "овражный" характер. Это означает, что небольшое изменение некоторых переменных приводит к резкому изменению значений функции – эта группа переменных характеризует "склон оврага", а по остальным переменным, задающим направление "дна оврага", функция меняется незначительно.

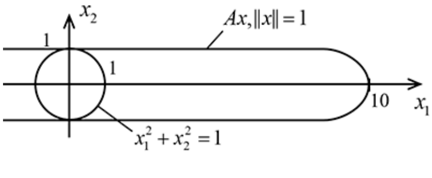


   Число $cond \overset{def}{=} \dfrac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} = \dfrac{L}{l}$ называется числом обусловленности матрицы $\Rightarrow cond \ge 1$.

   Матрица называется *хорошо обусловленной*, если $cond$ ~ 1 и наоборот.

   Вообще, число обусловленности геометрически можно трактовать как меру искажения отображения матрицей A единичной сферы. Действительно, $cond(A)$ есть отношение наибольшего к наименьшим расстояниям между точками на единичной сфере после её отображения матрицей A. Чем больше $cond(A)$, тем больше искажение единичной сферы при её преобразовании в эллиптическую форму – пусть $A = diag(10,1)$.

Вывод: Метод наискорейшего спуска быстро сходится для хорошо обусловленных матриц и наоборот.



Почему так много внимания уделяли квадратичной функции?

В окрестности locmin любую функцию можно приблизить квадратичной, и всё сказанное выше про матрицу A будет справедливым для матрицы Гесса $H(x^*)$, которая заменяет A в рассмотренном выше примере.

Геометрически: Линии уровня становятся замкнутыми и по мере приближения к x^* всё более напоминают эллипс.

Общий случай.

Определение 1. Функция φ на множестве $X \in R^n$ удовлетворяет *условию Липшица*, если существует $L > 0 : \forall u, \upsilon \in X \ \ \|\varphi(u) - \varphi(\upsilon)\| \le L\|u - \upsilon\|$. Если градиент функции φ существует, непрерывен и удовлетворяет условию Липшица, то обозначается $\varphi \in C^{1,1}$.

Определение 2. Функция φ называется *сильно выпуклой с параметром* $æ < 0$, если $\forall u, \upsilon \in X$, $\varphi(u) \ge \varphi(\upsilon) + \left(\varphi'(\upsilon) + u - \upsilon\right) + æ\|u - \upsilon\|^2$.

Теорема (о сходимости метода наискорейшего спуска). Рассмотрим задачу $\varphi(x) \to \min, x \in R^n$. Пусть $\varphi \in C^{1,1}(R^n)$ и φ – сильно выпуклая с параметром æ. Тогда при любом начальном приближении для последовательности $\{x_k\}$, построенной по методу наискорейшего спуска, справедливы соотношения:

1) $x_k \to x^* = \arg\min \varphi(x)$

2) $\varphi(x_k) - \varphi(x^*) \le \text{const} \cdot q^k, q = 1 - \dfrac{2æ}{L}, q \in [0,1)$

Замечания.

1. Для *квадратичной функции* $\varphi(x) = \dfrac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$:

   а) постоянная Липшица L есть наибольшее собственное число матрицы A:
   $$\|\varphi'(u) - \varphi(\upsilon)\| = \|Au - A\upsilon\| \le L\|u - \upsilon\|;$$

   б) она сильно выпукла с параметром $\dfrac{l}{2}$. Действительно,
   $$\varphi(u) - \varphi(\upsilon) = \frac{1}{2}(Au, u) - \frac{1}{2}(A\upsilon, \upsilon) - (b, u - \upsilon) =$$
   $$= \frac{1}{2}(A(u - \upsilon), u - \upsilon) + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon) \ge \frac{l}{2}\|u - \upsilon\|^2 + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon)$$

2. Эквивалентные *ограничения сильной выпуклости*:

   а) φ – сильно выпукла $\Leftrightarrow$ $\xi(u) = \varphi(u) = æ\|u\|^2$ – выпукла (это означает, что φ имеет "квадратичный запас" выпуклости);

   б) пусть $\varphi \in C^1$, φ – сильно выпукла $\Leftrightarrow$ $\left(\varphi'(u) - \varphi'(\upsilon), u - \upsilon\right) \ge 2æ\|u - \upsilon\|^2$;

   в) пусть $\varphi \in C^2$, φ – сильно выпукла $\Leftrightarrow$ $\left(\varphi''(u)x, x\right) \ge 2\,æ\|x\|^2$, $\forall x$, т.е. $\varphi''(u) \ge 2æI$ [в смысле положительной определенности разности матриц]. С другой стороны, из условия Липшица $\varphi''(u) \le LI$, поэтому для сильно выпуклой $\varphi \in C^2$ существует двойная оценка матрицы Гессе: $2æI \le \varphi''(u) \le LI$.

Покажем, что $2æ \le L$. С одной стороны, из б) имеем

$$\left(\varphi'(u) - \varphi'(\upsilon), u - \upsilon\right) \ge 2æ\left\|u - \upsilon\right\|^2$$

С другой стороны,

$$\left\|\varphi'(u) - \varphi'(\upsilon)\right\| \le L \cdot \left\|u - \upsilon\right\|$$

$$\Rightarrow\ 2æ\left\|u - \upsilon\right\|^2 \le \left(\varphi'(u) - \varphi'(\upsilon), u - \upsilon\right) \le \left\|\varphi'(u) - \varphi'(\upsilon)\right\| \cdot \left\|u - \upsilon\right\| \le L \cdot \left\|u - \upsilon\right\|^2 \Rightarrow 2æ \le L, \text{ ч.т.д.}$$

Выпуклость:

- $\varphi(u) \ge \varphi(\upsilon) + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon)$.

Строгая выпуклость:

- $\varphi(u) > \varphi(\upsilon) + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon)$.

Сильная выпуклость:

- $\varphi(u) \ge \varphi(\upsilon) + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon) + æ\left\|u - \upsilon\right\|^2$ для $\forall u, \upsilon \in R^n$

Графическое представление дифференциальных критериев выпуклости.

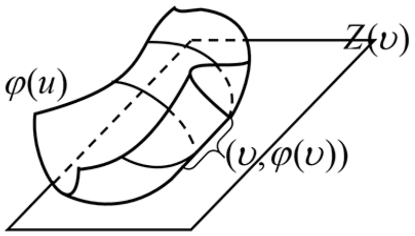


График *выпуклой* функции расположен не ниже касательной плоскости $Z = \varphi(\upsilon) + (\varphi'(\upsilon), u - \upsilon)$, проходящей через произв. точку поверхности $(\upsilon, \varphi(\upsilon))$.

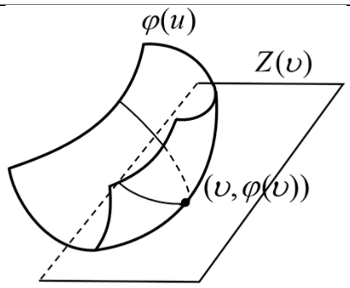
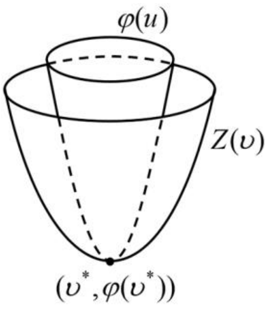


График *строго выпуклой* функции имеет единственную общую точку с этой плоскостью.



Пусть $\upsilon^* - (\cdot)\min \Rightarrow \varphi'(\upsilon^*) = 0 \Rightarrow \varphi(\upsilon^*) + æ\left\|u - \upsilon^*\right\|^2$.

Поверхность $Z = \varphi(\upsilon^*) + \frac{\cancel{2}æ}{\cancel{2}}\left\|u - \upsilon^*\right\|^2$ – это параболоид вращения с вершиной в точке $(\upsilon^*, \varphi(\upsilon^*))$

.

$\Rightarrow$ График *сильно выпуклой* функции расположен внутри некоторого параболоида вращения.

Другие градиентные методы

Напомним, градиентные методы заключаются в построении релаксационной последовательности:

$$\{x_k\}: x_{k+1} = x_k - \alpha_k \varphi'(x_k)$$

Градиентные методы различаются между собой способом выбора α_k.

1. Метод наискорейшего спуска, который был рассмотрен выше, заключается в выборе

$$\alpha_k = \arg\min \varphi\left(x_k - \alpha\varphi'(x_k)\right).$$

Такой способ выбора α_k является в некотором смысле наилучшим, т.к. он обеспечивает *достижение наименьшего значения функции* вдоль заданного направления. Однако он требует решения на любом шаге *одномерной задачи минимизации*. Эти задачи решаются, как правило, приближенно с помощью численных методов, что приводит к *значительному объему вычислений*. Кроме того, метод может привести к *плохой сходимости* (овраги!).

Другим подходом для построения релаксационной последовательности является попытка определить α_k до начала вычислений. Какие есть для этого основания?

Допустим, что можно построить оценку для α_k такую, что для $\varepsilon\in(0,1)$ выполняется неравенство

$$\varphi(x_{k+1}) - \varphi(x_k) \le -\varepsilon\cdot\alpha_k\cdot\|\varphi'(x_k)\|^2 \qquad (1)$$

Тогда очевидно, что $\varphi(x_{k+1}) < \varphi(x_k)$ и соответствующий метод минимизации будет методом спуска.

Справедливы следующие утверждения:

Лемма 1. Пусть функция $\varphi\in C^{1,1}(R^n)$ и

$$\|\varphi'(x) - \varphi'(x')\| \le M\,\|x - x'\|, x, x'\in R^n, M > 0$$

Тогда для $\forall x_k\in R^n$, $\varepsilon\in(0,1)$ условие (1) выполнено при

$$0 < \alpha_k \le \frac{1-\varepsilon}{M}$$

Лемма 2. Пусть φ дважды дифференцируема и матрица Гессе удовлетворяет условию Липшица и

$$\left(\varphi''(x)h, h\right) \le D\cdot\|h\|^2, x, h\in R^n, D > 0$$

Тогда для $\forall x_k\in R^n$, $\varepsilon\in(0,1)$ условие (1) выполняется при

$$0 < \alpha_k \le \frac{2(1-\varepsilon)}{D}$$

2. Градиентный метод с постоянным шагом.

В этом методе полагается $\alpha_k \equiv const$. При этом иногда удается добиться выполнения условия (1). Но для этого необходимо знать константы M и D, что далеко не всегда удается вычислить.

Т.о., метод прост в реализации, но есть проблемы со сходимостью.

Пример. Пусть $\varphi(x) = \alpha x^2$

$\varphi_{\min} = 0$; $x^* = 0$;

Тогда

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \cdot 2ax_k = (1-2a\alpha)\cdot x_k \Rightarrow |1-2a\alpha| < 1 \Leftrightarrow \text{метод сходится.}$$

Сходимость *медленная*!

3. Градиентный метод с убыванием длины шага.

В ряде методов достаточно потребовать выполнения условий:

$$\alpha_k > 0, k = 0,1,...;\ \sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k = \infty;\ \sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k^2 < \infty \quad (\text{например, } \alpha_k = \frac{c}{k+1})$$

На интуитивном уровне объяснение следующее:

- условие сходимости ряда $\sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k^2$ накладывают, чтобы добиться достаточно быстрой сходимости последовательности α_k к нулю с целью обеспечения сходимости метода в окрестности точки экстремума x^*.
- условие расходимости ряда $\sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k$ призвано обеспечить достижение точки экстремума x^* даже при неудачном выборе начального приближения x^0, т.е. при больших расстояниях от x^0 до x^*.

Сходимость *медленная*!

4. Градиентный метод с дроблением шага.

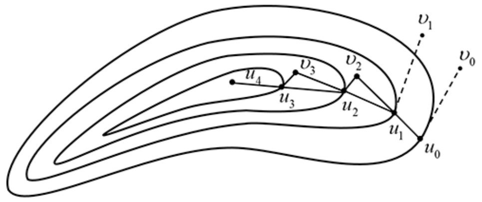
Ещё один адаптивный способ выбора коэффициентов α_k. Выбираются некоторые $const\beta > 0$ и $0 < \lambda < 1$ (обычно $\lambda = ½$). Для коэффициента $\alpha = \beta$ проверяется выполнение условия $\varphi(x_k - \alpha\varphi'(x_k)) \le \varphi(x_k)$. Если оно выполняется, то полагают $\alpha_k = \alpha$. Если нет, то производится дробление шага, т.е. принимается $\alpha = \lambda\beta$, и т.д. до тех пор, пока не выполнится требуемое неравенство.

Процесс дробления не может продолжаться бесконечно, поскольку $-\varphi'(x)$ – направление убывания функции. Первое α, при котором условие выполнено и принимается за α_k.

Как показывает следующая лемма, с помощью описанного процесса дробления шага можно добиться выполнения неравенства. (1)

Лемма 3. Пусть функция φ дифференцируема на R^n. Тогда для $\forall x_k \in R^n, \varepsilon \in (0,1)$ найдется такое $\alpha_0 > 0$, что при $\forall \alpha \in (0, \alpha_0]$ выполнено условие

$$\varphi\left(x_k - \alpha\varphi'(x_k)\right) - \varphi(x_k) \le -\varepsilon\alpha\left\|\varphi'(x_k)\right\|^2.$$



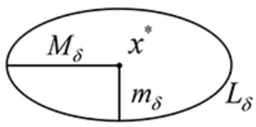
Если необходимое неравенство оказывается выполненным при начальном значении $\alpha = \beta$, то иногда полезно увеличить шаг, взяв $\alpha = \mu\beta$, где $\mu > 1$. Так можно продолжать до тех пор, пока значения функции не перестанут уменьшаться. Последнее α, при котором произошло уменьшение, и берется в этом случае за α_k.

5. Овражный метод – эвристический двухшаговый метод минимизации овражных функций.

Характеристика степени овражности:

Пусть x^* – точка минимума, $\delta > 0$.

Рассмотрим поверхность уровня $L_\delta = \left\{x : \varphi(x) = \varphi(x^*) + \delta\right\}$.

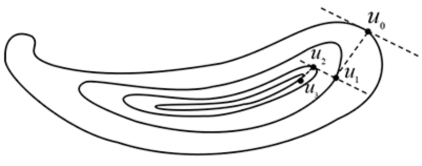


Введем $m_\delta = \min\limits_{x \in L_\delta}\left\|x - x^*\right\|$

$M_\delta = \max\limits_{x \in L_\delta}\left\|x - x^*\right\|$

Определение. Тогда $r = \overline{\lim\limits_{\delta \to 0}}\dfrac{M_\delta}{m_\delta}$ называется *числом обусловленности точки locmin*.

Рассмотрим "овражную" функцию (вытянута вдоль некоторых направлений). Если точка лежит на склоне оврага, то направление спуска из этой точки будет почти перпендикулярно к направлению "дна оврага", и в результате приближения $\{u_k\}$, получаемые градиентным методом, будут *поочередно находиться то на одном, то на другом "склоне оврага"*. Если "склоны оврага" достаточно круты, то такие скачки "со склона на склон" точек $\{u_k\}$ могут сильно замедлить сходимость градиентного метода.



Для ускорения сходимости можно предложить следующий эвристический прием, называемый *овражным методом*:

Пусть υ_0, υ_1 – две произвольные близкие точки. Совершаем из них по одному шагу методом наискорейшего спуска (или $\forall$ вариант градиентного метода).

Попадаем в окрестность "дна оврага". Соединяя их прямой, делаем большой шаг в полученном направлении, перемещаясь вдоль "дна оврага". Из полученной точки υ_2, которая находится на "склоне оврага", производят спуск с помощью градиентного метода и определяют следующую точку u_2 на "дне оврага" и т.д.

Формула метода выглядит следующим образом.

$$\upsilon_{k+1} = u_k - sign(\varphi(u_k) - \varphi(u_{k-1})) \cdot \frac{h}{\|u_k - u_{k-1}\|} \cdot (u_k - u_{k-1})$$

Здесь:

$sign(\varphi(u_k) - \varphi(u_{k-1}))$ определяет знак - чтобы спускаться, а не подниматься;

$(u_k - u_{k-1})$ - определяет направление спуска по дну оврага;

h - овражный шаг, выбирается эмпирически и от него многое зависит.

Если h – большое, то на крутых склонах точки υ_k могут *слишком далеко удаляться от "дна оврага"* $\Rightarrow$ большие объемы вычислений для градиентного метода спуска в очередную точку на "дне оврага", кроме этого может произойти выброс точки υ_k из "оврага" и *правильное направление поиска будет потеряно*.

Если h – малое, то эффект от применения овражного метода может быть незначительным.

Эффективность применения овражного метода может *резко возрасти*, если величину h выбирать переменной, реагирующей на "повороты" оврага, с тем, чтобы:

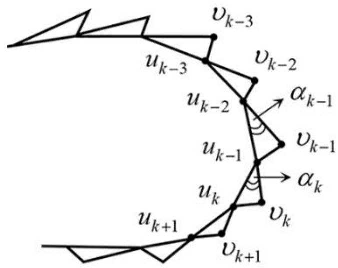
а) быстрее проходить прямолинейные участки на "дне оврага" за счет увеличения овражного шага;

б) на крутых поворотах "оврага" избежать выброса из "оврага" за счет уменьшения овражного шага;

в) добиться min отклонения точки υ_k от дна оврага с целью уменьшения объема вычислений для градиентного метода.

Для правильной реакции на "повороты" оврага надо учитывать "кривизну" оврага. Причем информацию о кривизне желательно получить по результатам предыдущих шагов.

Один из способов выбора шага:



$$h_{k+1} = h_k \cdot c^{\cos\alpha_k - \cos\alpha_{k-1}}, k = 2, 3\ldots,$$

где α_k – угол между векторами $\upsilon_k - u_{k-1}, u_k - u_{k-1}$, определяемый условием

$$\cos\alpha_k = \frac{(\upsilon_k - u_{k-1}, u_k - u_{k-1})}{\|\upsilon_k - u_{k-1}\| \cdot \|u_k - u_{k-1}\|},$$

$c - const > 1$ – параметр алгоритма.

α_k возрастает при возрастании кривизны $\Rightarrow$ при переходе от участка с меньшей кривизной на участок с большей кривизной имеем

$$\cos\alpha_k - \cos\alpha_{k-1} < 0 \Rightarrow h_{k+1} < h_k \text{ и наоборот.}$$

На участках с постоянной кривизной

$$\cos\alpha_k - \cos\alpha_{k-1} \approx 0$$

$\Rightarrow$ шаг остается постоянным, который был сформирован при выходе на рассматриваемый участок.

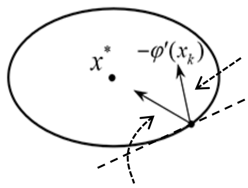
Параметр c регулирует чувствительность "метода к изменению кривизны (повороты)" и во многом определяет скорость движения "по оврагу".

Методы II порядка минимизации функции

(использование вторых производных)

Общая идея:

Последовательность $\{x_k\}$ будем строить по формулам:



$$x_{k+1} = x_k - \gamma_k H_k \varphi'(x_k),$$

где γ_k – длина шага, H_k – матрица поворота ($n \times m$).

Как выбрать матрицу H_k?

Если взять квадратичную функцию

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x), \varphi'(x) = Ax - b, x^* = A^{-1}b,$$

то хочется сразу попасть в экстремальную точку:

$$x_{k+1} = x_k - (x_k - A^{-1}b) = x_k - A^{-1}(Ax_k - b) = x_k - A^{-1} \cdot \varphi'(x_k) \Rightarrow x_{k+1} = x_k - A^{-1} \cdot \varphi'(x_k)$$

$\Rightarrow$ в качестве "матрицы доворота" надо брать $\gamma_k H_k = A^{-1}$.

В общем случае: пусть φ – дважды дифференцируема в R^n, разложим $\varphi(x)$ в ряд Тейлора в точке x_k:

$$\varphi(x) = \varphi(x_k) + (\varphi'(x_k), x - x_k) + \tfrac{1}{2}(\varphi''(x_k)(x - x_k), (x - x_k)) + o(\|x - x_k\|^2).$$

Иначе формулу можно представить в виде:

$$\varphi(x) = \bar{\varphi}(x) + o(\|x - x_k\|^2), \text{ где } \bar{\varphi}(x) \text{ – квадратичная функция.}$$

Пренебрегаем $o\left(\|x - x_k\|^2\right)$ и ищем $\min \bar{\varphi}(x)$.

$$x_{k+1} = \arg\min_x \bar{\varphi}(x) \Rightarrow \bar{\varphi}'(x) = \varphi'(x_k) + \varphi''(x_k)(x - x_k) = 0;$$

Пусть $\varphi''(x_k)$ – положительно определена для $\forall x_k \in R^n \Rightarrow$ существует $[\varphi''(x_k)^{-1}]$.

Решая это уравнение, получим:

$$x_{k+1} = x_k - [\varphi''(x_k)]^{-1} grad\varphi(x_k) \text{ – это и есть метод Ньютона.}$$

Квадратичная функция с положительно определенной φ'' сильно выпукла, тогда уравнение определяет единственную точку глобального минимума $\bar{\varphi}(x)$.

Далее рассмотрим пример использования метода Ньютона для решения задачи минимизации функции.

Пример.

$$\varphi(x) = x_1^3 + x_2^3 - 6x_1x_2 \to \min, x \in R^2$$

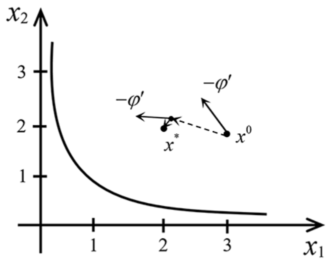
$$\varphi'(x) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 - 6x_2 \\ 3x_2^2 - 6x_1 \end{pmatrix}; \qquad H(x) = \begin{pmatrix} 6x_1 & -6 \\ -6 & 6x_2 \end{pmatrix}$$

Область существования $(\varphi''(x))^{-1}$ совпадает с областью положительной определенности матрицы $\varphi''(x)$, которую мы будем искать с помощью критерия Сильвестра.

Критерий Сильвестра.

Симметрическая матрица A положительно определена $\Leftrightarrow$ если все её главные миноры положительны. При этом главным минором матрицы A называется определитель матрицы, построенной из элементов матрицы A, стоящих на пересечении строк и столбцов с одинаковыми номерами.

$$\begin{cases} x_1 > 0 \\ 36x_1x_2 - 32 > 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 > 0 \\ x_1x_2 > 1 \end{cases}.$$



Возьмем $x^0 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$

$$\varphi'(x^0) = \begin{pmatrix} 15 \\ -6 \end{pmatrix};\ H(x^0) = 6\begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$H^{-1}(x^0) = \frac{1}{30}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$x^1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} - \frac{1}{30}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 15 \\ -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2,2 \\ 2,1 \end{pmatrix}$$

$$\varphi'(x_1) = \begin{pmatrix} 1,92 \\ 0,03 \end{pmatrix};\ H(x^1) = 6\begin{pmatrix} 2,2 & -1 \\ -1 & 2,1 \end{pmatrix};\ H^{-1}(x^1) = \frac{1}{21,72}\begin{pmatrix} 2,1 & 1 \\ 1 & 2,2 \end{pmatrix}$$

$$x^2 = \begin{pmatrix} 2,2 \\ 2,1 \end{pmatrix} - \frac{1}{21,72}\begin{pmatrix} 2,1 & 1 \\ 1 & 2,2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1,92 \\ 0,03 \end{pmatrix} = \ldots \approx \begin{pmatrix} 2,04 \\ 2,01 \end{pmatrix}, \text{ и.т.д.}$$

Можно показать, что сходимость при $x^0 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ будет хуже.

Достоинства метода Ньютона:

1. Для квадратичной функции сходится за один шаг (метод Ньютона можно рассмотреть, как градиентный метод с преобразованием координат [умножение на H^{-1}] таким, что исчезает "овраг", т.е. линии уровня становятся окружностями).
2. Высокая скорость сходимости. Можно показать, что

$$\left\| x_k - x^* \right\| \le const q^{2^k}, 0 < q < 1.$$

Порядок сходимости:

$$\overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{\ln\left\|x_{k+1}-x^*\right\|}{\ln\left\|x_k-x^*\right\|} = \overline{\lim_{k\to\infty}} \frac{const+2^{k+1}\ln q}{const+2^k \ln q} = 2$$

$\Rightarrow$ важен выбор q в алгоритме. Если q = 10^{-1}, то за один шаг точность результата увеличивается на 2 разряда, а при линейной сходимости – на один разряд.

Недостатки метода Ньютона:

1. Локальная сходимость (матрица Гессе должна быть невырожденной). Начальное приближение надо выбирать в окрестности точки локального минимума.
2. Большие вычислительные затраты:
   - вычисление матрицы φ'';
   - необходимость обращать её.
   -

Общие рекомендации: сначала применять градиентный метод, затем – метод Ньютона.

Например, существует так называемый метод Марквардта-Левенберга:

$$x_{k+1} = x_k - \gamma_k(\varphi''(x_k) + \alpha_k I)^{-1}\varphi'(x_k), \alpha_k > 0.$$

При больших α_k (вдали от x^*) матрица $\varphi''(x) + \alpha_k I \sim I,$ при $\alpha_k \to \infty$ и это фактически градиентный метод.

При малых α_k (вдали от x^*) это метод Ньютона.

Имеет место:

Теорема (о сходимости метода Ньютона).

Пусть

1) φ – сильно выпукла на R^n с параметром æ.

2) $\varphi \in c^{2,2}$, т.е. φ'' – дважды дифференцируема и φ'' удовлетворяет условию Липшица:

$$\exists L > 0 : \forall u, \upsilon \in R^n \ \left\|\varphi''(u) - \varphi''(\upsilon)\right\| \le L\left\|u-\upsilon\right\|;$$

3) Начальное приближение x^0 удовлетворяет условию

$$\|\varphi'(x^0)\| \le \frac{8æ^2}{L},$$

$$\text{т.е. } \left\|\varphi'(x^0)\right\| = \frac{8æ^2}{L}\cdot q \text{, где } 0 < q < 1.$$

Тогда последовательность $x_{k+1} = x_k - [\varphi''(x_k)]^{-1}\varphi'(x_k)$ сходится к точке минимума x^* с квадратичной скоростью:

$$\left\|x_k - x^*\right\| \le \frac{4æ}{L} q^{2^k}, x^* = \arg\min_x \varphi(x) \text{ (квадратичная сходимость)}$$

1. Несколько слов о норме матрицы:

Определение. Норму (n×n)-матрицы определим следующим образом:

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|},$$

Тогда

$$\|A\|^2 = \max_{x \neq 0} \frac{x^T A^T A x}{x^T x}.$$

Поскольку A^TA есть симметричная (n×n)-матрица, то существует ортогональная матрица $T(T^T = T^{-1})$ такая, что $T^T(A^TA)T$ – диагональная матрица $\Lambda = diag(\lambda_1,...,\lambda_n)$ $\Rightarrow$

$\|A\| = \lambda_1$, где λ_1^2 – наибольшее собственное значение матрицы A^TA.

$\|A^{-1}\| = \lambda_n^{-1}$, λ_n^2 – наименьшее собственное значение матрицы A^TA.

Для такой нормы выполняются все три условия

1) $\|A\| > 0$, если A – ненулевая (покомпонентно);
2) $\|A + B\| \le \|A\| + \|B\|$;
3) $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$, где α – скаляр.

Кроме того, из определения нормы матрицы следует, что

$$\|Ax\| \le \|A\| \cdot \|x\|.$$

Имеем также

$$\|AB\| \le \|A\| \cdot \|B\|.$$

2. Отметим ещё раз, что для сходимости метода Ньютона начальная точка x^0 должна выбираться достаточной близкой к искомой точке x^*. Это требование в теореме выражено условием 3). Действительно, сильная выпуклость φ означает:

$$2æ\|x^0 - x^*\|^2 \le (\varphi'(x^0) - \varphi'(x^*), x^0 - x^*) \le \|\varphi'(x^0\| \cdot \|x^0 - x^*\| = \frac{8æ^2}{L} q \|x^0 - x^*\|; \|x^0 - x^*\| \le \frac{4æ}{L} q;$$

$\Rightarrow$ чем меньше q, тем ближе надо выбирать точку x^0 к x^* и тем быстрее сходимость.

Достоинства и недостатки градиентных методов и метода Ньютона

Метод	**Достоинства**	**Недостатки**
Градиентный метод	1. Глобальная сходимость, т.е. слабые требования на начальные приближения точки x_0 и к $f(x)$; 2. Относительная простота вычислений	1. Медленная сходимость (геометрическая скорость сходимости, порядок сходимости $d = 1$); 2. Необходимость вычисления длины шага.

Метод Ньютона	1. Быстрая сходимость.	1. Локальная сходимость (начальная точка должна быть близка к x^*); 2. Большой объем вычислений (на любом шаге требуется вычислять матрицу вторых производных и обращать её). 3. Жесткие требования на саму функцию (непрерывная вторая производная).

Порядок применения методов

1) На 1-м этапе – методы 1-ого порядка, т.к. они обеспечивают глобальную сходимость.
2) На 2-м этапе (когда приращения невелики) – выгодно применять методы 2-ого порядка.

Перечисленные методы (градиентные и Ньютона) являются классическими.

Можно предложить методы более высокого порядка, тогда естественно ожидать, что порядок сходимости будет равен p.

Как уже отмечалось, к недостаткам метода Ньютона относится:

- локальная сходимость;
- большой объем вычислений;
- жесткие требования на гладкость функции.

В силу названных причин применение классического метода Ньютона не всегда приводит к успеху.

Многочисленные модификации направлены на то, чтобы, *сохраняя* основное достоинство метода Ньютона – *быструю сходимость*, *уменьшить трудоемкость и ослабить* требования на выбор *начального приближения*.

Метод Ньютона с регулировкой шага

Рассмотрим метод

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k h_k, \alpha_k > 0, h_k = -\left(\varphi''(x_k)\right)^{-1}\varphi'(x_k),$$

это метод Ньютона с регулировкой шага.

При $\alpha_k \equiv 1$ мы получили классический метод Ньютона.

Выбор α_k обычно – из условия min функции, вдоль заданного направления, или методом дробления шага, обеспечивающего выполнение условия $\varphi(x_{k+1}) < \varphi(x_k)$.

Можно показать, что подобные методы регулировки шага *сходятся* при *любой начальной* точке $x^0 \in R^n$, причем скорость сходимости будет либо *сверхлинейна*, либо *квадратичная* в зависимости от требований, которым удовлетворяет функция φ.

Таким образом, с помощью регулировки длины шага преодолевается недостаток метода, связанный с необходимостью отыскания хорошего начального приближения.

Однако, трудоемкость вычислений при этом не исчезает.

Более перспективным в этом плане оказывается другой подход, при котором строится аппроксимация матрицы $(\varphi''(x_k))^{-1}$ на основе информации о значениях градиентов $\varphi'(x_k)$, $\varphi'(x_{k+1}),\ldots$

Квазиньютоновы методы

Пусть функция φ дважды дифференцируема. Рассмотрим метод

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k H_k \cdot \varphi'(x_k) \tag{1}$$

α_k – шаг, H_k – матрица.

а) Если H_k = единичная, имеем градиентный метод.

б) Если $H_k = (\varphi''(x_k))^{-1}$, то это метод Ньютона (с точностью до шага).

в) Если $H_k \equiv H_k(\varphi'(x_i), i = 1, 2, ..., k) \approx (\varphi''(x_k))^{-1}$, то имеем метод, который объединяет достоинства обоих методов.

Заметим, что

$$\varphi'(x_k) - \varphi'(x_{k+1}) = \varphi''(x_{k+1})(x_k - x_{k+1}) + o\left(\left\|x_k - x_{k+1}\right\|\right).$$

Полагая невырожденной матрицу $\varphi''(x_{k+1})$, отсюда с точностью до членов более высокого порядка малости по сравнению с $\left\|x_k - x_{k+1}\right\|$ имеем:

$$\varphi''(x_{k+1})^{-1}(\varphi'(x_{k+1}) - \varphi'(x_k)) \approx x_{k+1} - x_k.$$

Рассмотрим квадратичную функцию $\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$. Для нее

$$\varphi'(x_{k+1}) = A(x_{k+1}) - b, \quad \varphi''(x_k) = A,$$

и приближенное равенство обращается в точное:

$$\varphi''(x_{k+1})^{-1}(\varphi'(x_{k+1}) - \varphi'(x_k)) = x_{k+1} - x_k.$$

Поэтому естественно потребовать, чтобы для матрицы H_{k+1}, приближающей $(\varphi''(x_{k+1}))^{-1}$, выполнялось условие:

$$H_{k+1}(\varphi'(x_{k+1}) - \varphi'(x_k)) = x_{k+1} - x_k \tag{*}$$

Это условие называется *квазиньютоновским*. Оно лежит в основе целого ряда методов аппроксимации $(\varphi'')^{-1}$. Соответствующие методы минимизации, для которых на любом шаге выполняется квазиньютоновское условие, также называются квазиньютоновскими.

Пусть приближения к $(\varphi'')^{-1}$ пересчитываются шаг от шага по формуле $H_{k+1} = H_k + \Delta H_k$.

Различные квазиньютоновские методы различаются способом вычисления "добавки" ΔH_k таким образом, чтобы удовлетворялось соотношение (*).

1. Метод Дэвидона-Флетчера-Пауэлла

Обозначим:

$$\left.\begin{aligned} q_k &= \varphi'(x_{k+1}) - \varphi'(x_k) \\ r_k &= x_{k+1} - x_k \end{aligned}\right\} (*) \Rightarrow H_{k+1} \cdot q_k = r_k$$

Метод заключается в построении релаксационной последовательности по следующему правилу:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k H_k \varphi'(x_k)$$

$$H_{k+1} = H_k + \underbrace{\left[\frac{r_k \cdot r_k{}^T}{(r_k, \cdot q_k)} - \frac{(H_k q_k)(H_k q_k)^T}{(H_k q_k, q_k)}\right]}_{\Delta H_k} \qquad (1.1)$$

Длина шага α_k в квазиньютоновых методах выбирается так же, как в методе наискорейшего спуска:

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha \ge 0} \varphi(x_k - \alpha H_k \varphi'(x_k))$$

Как правило, начальное значение $H_0 = I$. Вообще, если H_0 – симметричная матрица, то H_k – симметричная матрица для любого k.

2. Метод Бройдена-Флетчера-Шанно

Имеем

$(H_{k+1})^{-1} r_k = q_k$.

Если поставить задачу уточнять обратную матрицу, т.е. $G_k = (H_k)^{-1}, G_{k+1} = G_k + \Delta G_k$ тогда:

$$H_{k+1} = H_k + \left[1 + \frac{(q_k, H_k q_k)}{(r_k, q_k)}\right] \cdot \frac{r_k r_k{}^T}{(r_k, q_k)} - \frac{r_k q_k{}^T H_k + H_k q_k r_k{}^T}{(r_k q_k)} \qquad (1.2)$$

(этот метод более устойчив к ошибкам округления)

Можно доказать, что для квадратичной функции $\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x)$, где A – симметричная, положительно определенная матрица, оба метода (1.1) и (1.2) при любом начальном приближении $x_0 \in R^n$ генерируют одну и ту же последовательность точек $x_1, x_2, ..., x_n$, причем

$$H_n = (\varphi''(x_n))^{-1} = A^{-1}, \quad x_n = x^* = -A^{-1} b = \arg\min_{x \in R^n} \varphi(x),$$

т.е. *квазиньютоновские методы* позволяют найти min *квадратичной* функции *за n-шагов*.

Для неквадратичной функции, это не так. Однако можно показать, что при соответствующих предположениях $H_k - (\varphi''(x_k))^{-1} \to 0, x_n \to x$, причем скорость сходимости сверхлинейна.

Так, например, пусть φ – дважды непрерывно дифференцируемая функция, сильно выпукла на R^n.

Тогда при любом начальном приближении $x_0 \in R^n$ последовательность точек $\{x_k\}$, определяемая формулами (1.1.) и (1.2), сходится к x^*.

Если, при этом, для всех $x: \varphi(x) \le \varphi(x_0)$, справедливы неравенства

$$\left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_y}(x) - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_y}(x^*) \right\| \le M \left\| x - x^* \right\|, \ i, j = 1, \dots, n,$$

то x_k сходится к x^* сверхлинейно

$$\left(\left\| x_{k+1} - x^* \right\| \le q_{k+1} \left\| x_k - x^* \right\|, q_k \to 0+, \ k \to \infty \right).$$

Замечания о квазиньютоновских методах:

1) Это двухшаговые методы.
2) Для квадратичных функций сходятся за *n*-шагов.
3) Обладают следующими преимуществами:
    - небольшая вычислительная сложность;
    - более глобальная сходимость, чем в методе Ньютона;
    - сверхлинейная скорость сходимости.