Методы оптимизации

Михайлов Максим

18 ноября 2022 г.

Оглавление

Лекция 1

10 февраля

Этот курс — о минимизации *(максимизации)* функционалов. Кроме конкретных методов оптимизации, планируется рассмотреть форматы хранения матриц, о методах работы с ними и рассмотреть 1-2 *(может быть 3)* СЛАУ с использованием различных форматов.

Т.к. значения, получаемые компьютерами — не точные, нам требуется теория погрешности.

1 Теория погрешности

Все погрешности разделяются на два класса:

1. Неустранимая — обусловлена неточностью исходных данных. Например, неточное знание физических констант или других параметров задачи. Тем не менее, необходимо знать эту погрешность, чтобы ставить рамки погрешности для решения.
2. Устранимая — погрешность процесса решения задачи. Эту погрешность можно уменьшить выбором метода решения задачи.
   (a) Погрешность модели
   (b) Остаточная погрешность *(погрешность аппроксимации)*

   Например, аппроксимация ряда первыми n его членами или аппроксимация по теореме Вейерштрасса квадратичной функцией.
   (c) Погрешность округления
   (d) Накапливаемая погрешность

   2c и 2d часто объединяют в вычислительную погрешность.

Определение. Пусть X^* — точное решение, а X — найденное *(приближенное)* решение. Тогда $X^* - X$ называется **погрешностью**, а её модуль $\Delta X = |X^* - X|$ — **абсолютная погрешность**.

Разумеется, ΔX представляет сугубо теоретический интерес, т.к. X^* неизвестна и ΔX нельзя вычислить.

Определение. В качестве требования к решению часто предоставляется **предельная абсолютная погрешность** $\Delta_X \geq |X^* - X|$.

Определение. Также существует **относительная погрешность** $\delta X = \left|\dfrac{X^* - X}{|X|}\right|$

Относительная погрешность позволяет выражать погрешность относительно значений самой величины. Например, при измерении длины парты погрешность 1 см не очень хорошо, а при измерении расстояния между городами — приемлемо.

Определение. Предельная относительная погрешность $\delta_X \geq \left|\dfrac{X^* - X}{|X|}\right|$

Определение. Значащие цифры некоторого числа — все цифры в его изображении, отличные от нуля, а также нули, если они содержатся между значащими цифрами или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряда точности.

Определение. Если значащая цифра приближенного значения a, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие $\Delta \leq 0.5 \cdot 10^k$, т.е. абсолютное значение погрешности не превосходит половину единицы этого разряда *(k — номер этого разряда)*, то такая цифра называется **верной в узком смысле**.

Цифра называется **верной в широком смысле**, если в определении выше используется 1 вместо 0.5.

Пример. $a = 3.635, \Delta a = 0.003$

- $k = 0 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$
- $k = -1 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-1} = 0.05 \geq \Delta a$
- $k = -2 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-2} = 0.005 \geq \Delta a$
- $k = -3 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0.0005 < \Delta a$

Таким образом, цифра 5 является сомнительной, остальные — верные.

Пример. Рассмотрим следующие способы записи одного и того же выражения:

$$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3 = (\sqrt{2}-1)^6 = (3-2\sqrt{2})^3 = 99 - 70\sqrt{2}$$

Посчитаем все выражения с различными приближениями $\sqrt{2}$:

- $\frac{7}{5} = 1.4$
- $\frac{17}{12} = 1.41666$
- $\frac{707}{500} = 1.414$
- $\sqrt{2} = 1.4142135624$

$\sqrt{2}$	$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$	$(\sqrt{2}-1)^6$	$(3-2\sqrt{2})^3$	$99-70\sqrt{2}$
$\frac{7}{5}$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$\frac{64}{15625} \approx 0.00\underline{5}1$	$\frac{1}{125} = 0.008$	1
$\frac{17}{12}$	$\frac{125}{24389} \approx 0.00\underline{51}3$	$\frac{15625}{2985354} \approx 0.00\underline{5}2$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$-\frac{1}{6} = -0.6(6)$
$\frac{707}{500}$	$\frac{8869743}{1758416743} \approx 0.00\underline{50}44$	$\frac{78672340886049}{15625 \cdot 10^{12}} \approx 0.00\underline{50}4$	$\frac{636056}{125000000} \approx 0.00\underline{50}9$	0.02

$$\Delta_{(X \pm Y)} = \Delta_X + \Delta_Y$$

$$\Delta_{(X \cdot Y)} \approx |Y|\Delta_X + |X|\Delta_Y$$

$$\Delta_{(X/Y)} \approx \left|\frac{1}{Y}\right| \Delta_X + \left|\frac{X}{Y^2}\right| \Delta_Y$$

$$|\Delta u| = |f(x_1 + \Delta x_1, \ldots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1 \ldots x_n)|$$

$$|\Delta u| \approx |df(x_1 \ldots x_n)| = \left|\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i\right| \leq \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\Delta_u = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| \Delta x_i$$

$$|\delta u| = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_u = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_{(X \pm Y)} = \left|\frac{X}{X \pm Y}\right| \delta_X + \left|\frac{Y}{X \pm Y}\right| \delta_Y$$

$$\delta_{(X \cdot Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

$$\delta_{(X/Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

Вернемся к прошлому примеру и посчитаем относительную погрешность.

$\lhd x = \frac{7}{5}$

$$\delta_{f_1} = 3\left|\frac{1}{x-1} - \frac{1}{x+1}\right| \cdot |\delta x| = 6.25|\delta x|$$

$$\delta_{f_2} = 6\left|\frac{1}{x-1}\right| \cdot |\delta x| = 15|\delta x|$$

$$\delta_{f_3} = 6\left|\frac{1}{3-2x}\right| \cdot |\delta x| = 30|\delta x|$$

$$\delta_{f_4} = \left|\frac{90}{99-70x}\right| \cdot |\delta x| = 70|\delta x|$$

Таким образом, наибольшую погрешность даёт f_4, наименьшую — f_1.

Пример.

$$y^2 - 140y + 1 = 0$$

$$y = 70 - \sqrt{4899}$$

$$\sqrt{4899} \approx 69.99$$

$$y \approx 70 - 69.99 = 0.0\underline{1}$$

Посчитаем другим методом — избавимся от вычитания похожих чисел.

$$y = \frac{1}{70 + \sqrt{4899}}$$

$$y = \frac{1}{139.99} \approx \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.00\underline{7143}$$

Можно заметить, что результат весьма точнее.

Пример. Рассмотрим задачу вычисления суммы $S = \sum_{j=1}^{10^6} \frac{1}{j^2}$.

Если суммировать по формуле $S_n = S_{n-1} + \frac{1}{n^2}$, то из-за того, что сначала суммируются большие числа, а потом малые, погрешность велика: $\Delta = 10^6 \cdot 2^{-1} \approx 2 \cdot 10^{-4}$

Если же суммировать с конца, то $\Delta = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \approx 6 \cdot 10^{-8}$

Рекомендации для увеличения точности вычислений:

1. Если складывать или вычитать последовательность чисел, то лучше начинать с малых членов.
2. Желательно избавляться от вычитания двух почти равных чисел, по возможности преобразую формулу.
3. Необходимо сводить к минимуму число математических операций. Это также способствует ускорению работы алгоритма.

4. Если ЯП и компьютер позволяют использовать числа разных типов, то числа с большим числом разрядов всегда повышают точность вычислений *(в ущерб памяти).*

Дробные числа нужно сравнивать с помощью ε, т.е. $|a - b| \leq \varepsilon$

2 Задачи оптимизации. Вводное.

Здесь и далее **целевая функция** — функция, которую мы минимизируем.

Обозначение. Пусть целевая функция — $f(x)$. Это обозначается как $f(x) \xrightarrow{x \in U} \min$.

$f(x) \to \max \Rightarrow -f(x) \to \min$. Таким образом, мы без потери общности рассматриваем задачу минимизации.

Определение. Если $\exists x^* \in U \quad f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in U$, то такой x^* называется **точкой *(глобального)* минимума**

Обозначение. Множество всех точек минимума обозначается $U^* = \{x_i^* \mid i = 1 \dots k\}$

Мы рассматриваем класс функций таких, что $U^* \neq \varnothing$

Определение. Функция $f(x)$ называется **унимодальной** на $[a, b]$, если она:

1. Непрерывна на $[a, b]$
2. $\exists \alpha, \beta : a \leq \alpha \leq \beta \leq b$, такие что:
   (a) Если $a < \alpha$, то на $[a, \alpha] \quad f(x)$ строго монотонно убывает.
   (b) Если $\beta < b$, то на $[\beta, b] \quad f(x)$ строго монотонно возрастает.
   (c) $\forall x \in [\alpha, \beta] \quad f(x) = f_* = \min\limits_{[a,b]} f(x)$

Свойства.

1. Если функция унимодальна на $[a, b]$, то она унимодальна и на $[c, d] \subset [a, b]$
2. Если f унимодальна на $[a, b], a \leq x_1 < x_2 \leq b$, тогда:
   (a) Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$
   (b) Если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, b]$

Определение. $f(x)$, заданная на $[a, b]$, называется выпуклой на этом отрезке, если

$$\forall x', x'' \in [a, b], \alpha \in [0, 1] \quad f(\alpha x' + (1 - \alpha)x'') \leq \alpha f(x') + (1 - \alpha) f(x'')$$

Свойства.

1. Если $f(x)$ выпукло на $[a, b]$, то $\forall [x', x''] \subset [a, b]$, то её график расположен ниже хорды между x' и x''

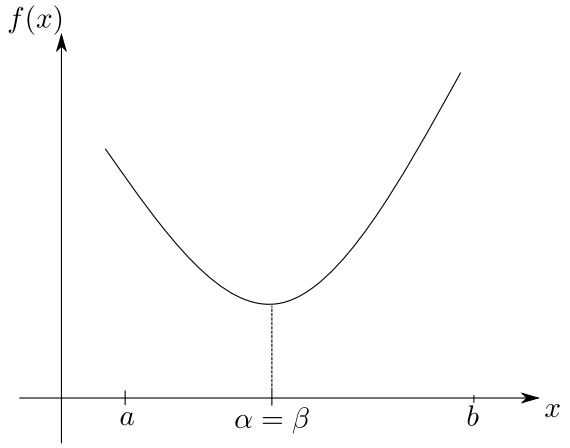


Рис. 1.1: Вырожденные α и β, унимодальная функция

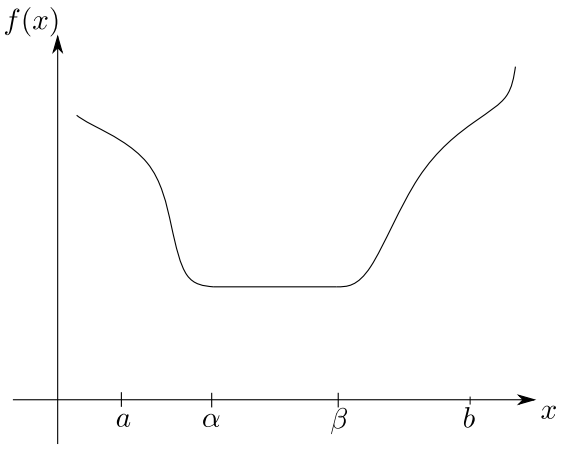


Рис. 1.2: Унимодальная функция

2. Всякая выпуклая функция на отрезке является унимодальной на нём.

Определение. Стационарные точки — точки x, для которых $f'(x) = 0$.

Мы будем рассматривать одномерные задачи оптимизации, т.к. многомерные задачи часто сводятся к одномерным.

3 Одномерная минимизация функций. Прямые методы.

Прямые методы — методы, не использующие производные целевой функции.

3.1 Метод дихотомии

Этот метод — тернарный поиск.

$$x_1 = \frac{b + a - \delta}{2} \quad x_2 = \frac{b + a + \delta}{2}$$

$$\tau = \frac{b - x_1}{b - a} = \frac{x_2 - a}{b - a} \to \frac{1}{2}$$

$$x^* \in [a_i, b_i] \ \ \forall i$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2, вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$

Шаг 2: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

- Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, переходим к отрезку $[a, x_2]$, т.е. $b = x_2$
- Иначе переходим к $[x_1, b]$, т.е. $a = x_1$

Шаг 3: $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$, где n — номер итерации.

- Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, переходим к новой итерации.
- Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, завершаем поиск и переходим к шагу 4.

Шаг 4: $X^* \approx \overline{X} = \frac{a+b}{2}$

Примечание. δ выбирается на интервале $(0, 2\varepsilon)$. Чем меньше δ, тем больше относительное уменьшение длины отрезка на каждой итерации. При черезмерно малом δ сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$ будет затруднительно, т.к. они близки.

Мы можем оценить число необходимых итераций:

$$n \geq \log_2 \frac{b - a - \delta}{2\varepsilon - \delta}$$

Лекция 2

17 февраля

3.2 Метод золотого сечения

Рассмотрим отрезок $[0, 1]$. Пусть $x_2 = \tau$, тогда симметрично расположенная $x_1 = 1 - \tau$. Пусть дальше был выбран отрезок $[0, \tau]$, тогда пусть $x_2' = 1 - \tau$. Чтобы новые точки делили отрезок в таком же соотношении, необходимо, чтобы $\frac{1}{\tau} = \frac{\tau}{1-\tau} \Rightarrow \tau^2 = 1 - \tau \Rightarrow \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.61803$. Таким образом, $x_1 = 1 - \tau = \frac{3-\sqrt{5}}{2}, x_2 = \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$

В общем случае для отрезка $[a, b]$:

$$x_1 = a + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b - a), x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a) \tag{1}$$

Вычислим погрешность:

$$\Delta_n = \tau^n(b - a) \quad \varepsilon_n = \frac{\Delta_n}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2}\right)^n (b - a)$$

Для заданного ε условия окончания $\varepsilon_n \leq \varepsilon$.

Результат метода:

$$x^* = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$$

Оценка числа шагов для достижения искомой точности:

$$n \geq \ln\left(\frac{\frac{2\varepsilon}{b-a}}{\ln \tau}\right) \approx 2 \cdot 1 \cdot \ln\left(\frac{b - a}{2\varepsilon}\right)$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2 по формуле (1), вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$. $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}, \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$.

Шаг 2:
- Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, переходим к шагу 3.
- Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, переходим к шагу 4.

Шаг 3: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.
- Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $b = x_2, x_2 = x_1, x_1 = b - \tau(b-a)$. Мы запоминаем $f(x_2)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_1)$ на этом шаге.
- Иначе $a = x_1, x_1 = x_2, f(x_1) = f(x_2)$. Мы запоминаем $f(x_1)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_2)$ на этом шаге.

Шаг 4: $X^* \approx \overline{X} = \frac{a_{(n)}+b_{(n)}}{2}$

3.3 Метод Фибоначчи

Мы знаем, что $F_n = \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^n}{\sqrt{5}}$, а также при $n \to +\infty$ $F_n \approx \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n}{\sqrt{5}}$

Рассмотрим нулевую итерацию:

$$x_1 = a + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b-a) \quad x_2 = a + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b-a)$$

Рассмотрим k-тую итерацию:

$$x_1 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

$$x_2 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

Пусть $k = n$, тогда:

$$x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+2}}(b_0 - a_0) \quad x_2 = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

Условие на погрешность:

$$\frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b_0 - a_0}{F_{n+2}} < \varepsilon$$

Какое брать n? Такое, что $\frac{b_0-a_0}{\varepsilon} < F_{n+2}$

Есть проблема, при большом n $\frac{F_n}{F_{n+2}}$ есть бесконечная десятичная дробь, вследствие чего образуется погрешность.

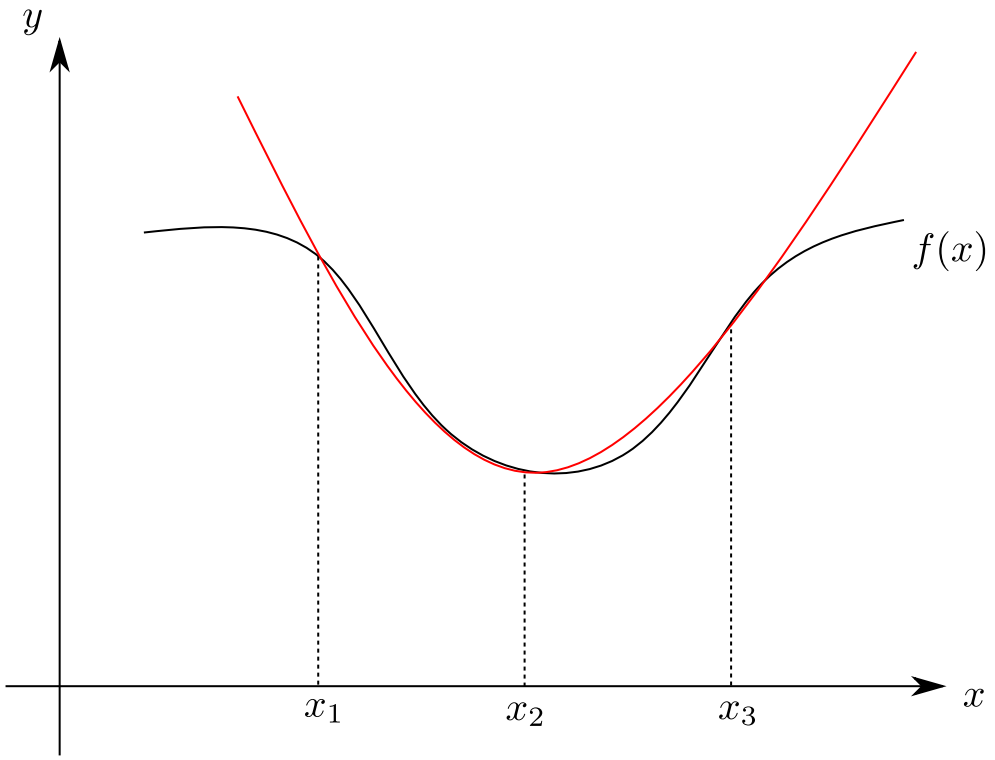


Рис. 2.1: Функция $f(x)$ и её приближение параболой.

3.4 Метод парабол

Пусть $\exists x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$, такие что $\begin{cases} x_1 < x_2 < x_3 \\ f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3) \end{cases}$

Тогда приближающая парабола имеет вид $q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$.

Мы имеем условия на коэффициенты этой параболы: $\begin{cases} q(x_1) = f(x_1) = f_1 \\ q(x_2) = f(x_2) = f_2 \\ q(x_3) = f(x_3) = f_3 \end{cases}$

Коэффициенты можно найти следующим образом:

$$a_0 = f_1 \quad a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \quad a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2}\left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}\right)$$

Тогда результат итерации есть $\overline{x} = \frac{1}{2}\left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2}\right)$, на следующей лекции будет рассказан переход к следующей итерации.

Точки x_1, x_2, x_3 для новой итерации выбираются следующим образом:

1. (a) Если $x_1 < \overline{x} < x_2 < x_3$ и $f(\overline{x}) \geq f(x_2)$, то $x^* \in [\overline{x}, x_3], x_1 = \overline{x}$, точки x_2 и x_3 не меняются.

(b) Если $x_1 < \overline{x} < x_2 < x_3$ и $f(\overline{x}) < f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, x_2], x_3 = x_2, x_2 = \overline{x}$, точка x_1 не меняется.

2. (a) Если $x_1 < x_2 < \overline{x} < x_3$ и $f(\overline{x}) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [x_2, x_3], x_1 = x_2, x_2 = \overline{x}$, точка x_3 не меняется.

(b) Если $x_1 < x_2 < \overline{x} < x_3$ и $f(\overline{x}) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, \overline{x}], x_3 = \overline{x}$, точки x_1 и x_2 не меняются.

Примечание. Метод парабол имеет квадратичную сходимость.

Примечание. Метод парабол требует гладкость функции, что неверно для предыдущих методов.

3.5 Комбинированный метод Брента

Для собственного изучения.

Лекция 3

24 февраля

3.6 Метод равномерного перебора

Шаг 1: Если $f(x_0) > f(x_0 + \delta)$, то $k = 1, x_1 = x_0 + \delta, h = \delta$

иначе $x_1 = x_0, h = -\delta$

Шаг 2: $h = 2h, x_{k+1} = x_k + h$

Шаг 3: Если $f(x_k) > f(x_{k+1})$, то $k = k + 1$ и переходим к шагу 2. Иначе прекращаем поиск и искомое лежит в $[x_{k-1}, x_{k+1}]$

4 Методы оптимизации, использующие производную

В рамках этой главы $f(x)$ — дифференцируемая или дважды дифференцируемая выпуклая функция.

Есть три классических метода, использующих производную:

- Средней точки
- Метод хорд
- Метод Ньютона

$f'(x) = 0$ — необходимое и достаточное условие глобального минимума. Таким образом, условие остановки вычислений — $f'(x) \approx 0$, т.е. $|f'(x)| \leq \varepsilon$

4.1 Методы средней точки

Средняя точка $\overline{x} = \frac{a+b}{2}$.

Общая идея алгоритма:

- Если $f'(x) > 0$, то $\overline{x} \in$ участку монотонного возрастания $f(x)$ и $x^* < \overline{x}$, т.е. минимум лежит на $[a, \overline{x}]$
- Если $f'(x) < 0$, то аналогично можем вывести, что минимум лежит на $[\overline{x}, b]$
- Если $f'(x) = 0$, то мы нашли решение.

Перепишем это в виде алгоритма:

Шаг 1: $\overline{x} = \frac{a+b}{2}$, вычислим $f'(\overline{x})$

Шаг 2: Если $|f'(x)| \leq \varepsilon$, то $x^* = \overline{x}$ и завершаем вычисление.

Шаг 3: Сравниваем $f'(x)$ с нулём:

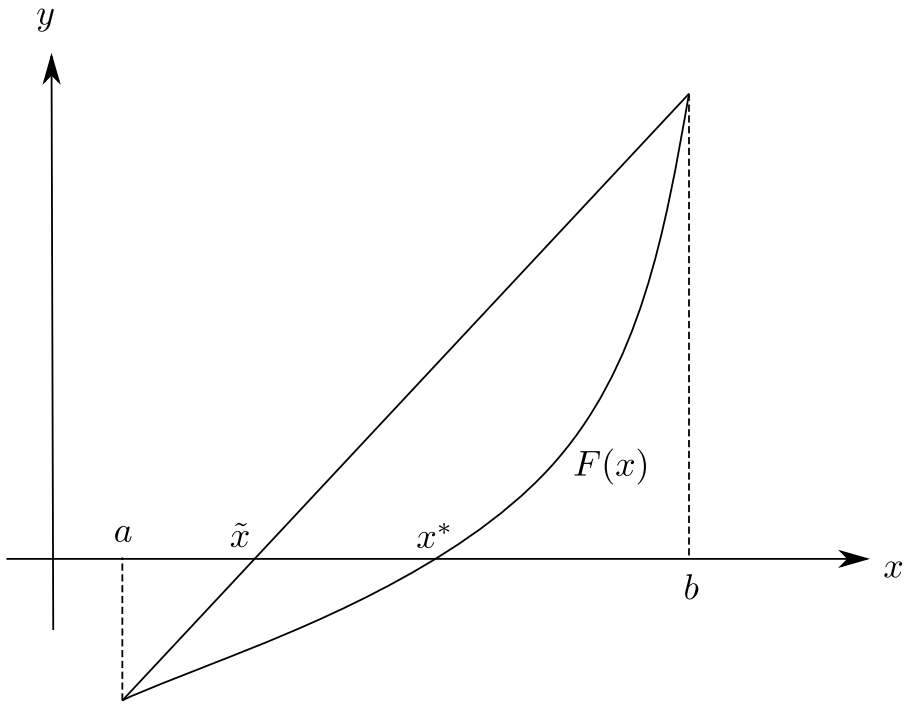
- Если $f'(x) > 0$, то $x^* \in [a, \overline{x}]$ и $b = \overline{x}$
- Иначе $x^* \in [\overline{x}, b]$ и $a = \overline{x}$

Длина отрезка после n итераций есть $\Delta_n = \frac{b-a}{2^n}$

4.2 Метод хорд *(метод секущей)*

Если $\exists f'(x)$ на $[a, b]$, $f'(a) \cdot f'(b) < 0$ и $f'(x)$ непрерывна на $[a, b]$, то $\exists x \in (a, b) : f'(x) = 0$.

$F(x) = f'(x)$. Пусть $\tilde{x}$ — точка пересечения хорды $F(x)$ с осью Ox на $[a, b]$



Можем тривиально вывести $\tilde{x}$ из уравнения прямой по двум точками:

$$\tilde{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b) \tag{2}$$

Шаг 1: Считаем $\tilde{x}$ по (2)

Шаг 2: Если $|f'(\tilde{x})| \leq \varepsilon$, то $x^* = \tilde{x}$ и мы заканчиваем вычисление.

Иначе шаг 3.

Шаг 3: Переходим к новому отрезку:

- Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то $x^* \in [a, \tilde{x}], b = \tilde{x}, f'(b) = f'(\tilde{x})$, переходим к шагу 1
- иначе $x^* \in [\tilde{x}, b], a = \tilde{x}, f'(a) = f'(\tilde{x})$, переходим к шагу 1

Примечание. Если $f'(a) \cdot f'(b) \geq 0$, то $x^* = a$ или $x^* = b$.

4.3 Метод Ньютона *(метод касательной)*

Если f выпуклая на $[a, b]$ и дважды непрерывно дифференцируемая, то уравнение $f'(x) = 0$ решается методом Ньютона.

Пусть $x_0 \in [a, b]$ — начальное приближение x^*. $F(x) = f'(x)$ линеаризуема в окрестности x_0, т.е.

$$F(x) \approx F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0)$$

Пусть x_1 — следующее приближение к x^*. Это будет пересечение касательной с Ox. Найдём эту точку.

$$F(x_0) + F'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$
$$x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$$

Таким образом, мы можем получить $\{x_k\}_{k=1}^n$ — итерационную последовательность.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

Условие остановки такое же, как в предыдущих методах: $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$

Лекция 4

3 марта

Пусть x_k — текущая оценка решения x^*

Рассмотрим ряд Тейлора:

$$f(x_k + p) = f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) + \dots$$

$$\begin{aligned} f(x*) &= \min_x f(x) \\ &= \min_p f(x_k + p) \\ &= \min_p \left(f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) + \dots \right) \\ &\approx \min_p \left(f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) \right) \end{aligned}$$

Приравняем производную выражения под $\min$ к нулю:

$$f'(x_k) + pf''(x_k) = 0$$

$$p = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

Тогда $x^* \approx x_k + p$ и $x_{k+1} = x_k + p = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$

Главное преимущество метода Ньютона — квадратичная скорость сходимости, т.е. если x_k достаточно близка к x^* и $f''(x^*) > 0$, то $|x_{k+1} - x^*| \leq \beta |x_k - x^*|^2$

Метод Ньютона может потерпеть неудачу в следующих случаях:

1. $f(x)$ плохо аппроксимируется первыми тремя членами в ряде Тейлора. Тогда x_{k+1} может быть хуже *(как аппроксимация)* x_k.
2. $f''(x_k) = 0$, тогда p не определен.
3. Кроме f нужно вычислять f' и f'', что затруднительно в реальных задачах.

Мы можем аппроксимировать производную по определению:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h}$$

Эта формула называется правой разностной схемой, у нее есть улучшение, называемое центральной разностной схемой:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k - h)}{2h}$$

Если $f(x)$ — квадратичная функция, то метод Ньютона сходится за один шаг при любом выборе x_0.

4.3.1 Достаточное условие монотонной сходимости метода Ньютона

Пусть $x^* \in [a, b]$ и $f(x)$ трижды непрерывно дифференцируемая и выпуклая на $[a, b]$ функция. Тогда $\{x_k\}$ будет сходиться к пределу x^* монотонно, если $0 < \frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} < 1$

$$f'(x^*) = 0 = f'(x_k) + f''(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f'''(x)}{2}(x^* - x_k)^2$$

$$\frac{x^K - x_{k+1}}{x^* - x_k} = \frac{x^* - x_k + \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}}{x^* - x_k} = 1 - \frac{2}{2 + \frac{f'''(x)(x^* - x_k)^2}{f'(x_k)}}$$

Последовательность итераций $\{x_k\}$ монотонна, если $\frac{f'''(x)}{f'(x_k)} > 0$, таким образом условие монотонной сходимости метода Ньютона — постоянство на $x \in [x^*, x_0]$ знака $f'''(x)$ и его совпадение с $f'(x_0)$.

Пример. $f(x) = x \cdot \operatorname{arctg}(x) - \frac{1}{2}$???

$$f'(x) = \operatorname{arctg} x \quad f''(x) = \frac{1}{1 + x^2} > 0 \quad f'''(x) = -\frac{2x}{(1 + x^2)^2}$$

$f'(x) \cdot f'''(x) < 0$, таким образом не будет монотонной сходимости.

Пусть $x_0 = 1$.

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$
0	1	0.785	$\frac{1}{2}$
1	-0.57	-0.518	a
2	0.117	0.	
4	$9 \cdot 10^{-8}$		

4.4 Модификации метода Ньютона

4.4.1 Метод Ньютона-Рафсона

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, 0 < \tau_k \leq 1$$

τ_k — константы. Если $\tau = 1$, то метод Ньютона-Рафсона вырождается в метод Ньютона.

Для нахождения τ_k зададим $\varphi(\tau)$:

$$\varphi(\tau) = f(x_k - \tau \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}) \to \min$$

Тогда

$$\tau_k = \frac{(f'(x_k))^2}{(f'(x_k))^2 + (f'(\tilde{x}))^2}$$, где $\tilde{x} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$

4.4.2 Метод Марквардта

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k) + \mu_k}$$

, где $\mu_k > 0$

μ_0 выбирают на порядок выше значения $f''(x_0)$, $\mu_{k+1} = \begin{cases} \frac{m_k}{2} & \text{, если } f(x_{k+1}) < f(x_k) \\ \mu_{k+1} = 2\mu_k & \text{, если } f(x_{k+1}) \geq f(x_k) \end{cases}$

5 Метод минимизации многомодальных функций *(метод ломаных)*

Определение. $f(x), x \in [a, b]$ **удовлетворяет условию Липшица**, если $\forall x_1, x_2 \in [a, b]$ $|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|$

Шаг 1 Возьмём $x_1^* = \frac{1}{2L}(f(a) - f(b) + L(a + b))$ и $p_1^* = \frac{1}{2}(f(a) + f(b) + L(a - b))$. Добавим в рассматриваемое множество $x_1' = x_1^* - \Delta_1$ и $x_1'' = x_1^* + \Delta_1$, где $\Delta_1 = \frac{1}{2L}(f(x_1^*) - p_1)$

Шаг 2 Иизпар (x_1', p_1) и (x_1'', p_1) выберем пару с минимальной p : (x_2^*, p_2^*) и исключим из рассматриваемого множества.

Шаг n В результате мы получим множество из n пар (x, p). Исключаем пару с минимальной p и вместо неё

Пример. $f(x) = \frac{\sin x}{x}$, $[a, b] = [10, 15]$, $\varepsilon = 0.01$

Проверим условие Липшица:

$$|f'(x)| = \left|\frac{x\cos x - \sin x}{x^2}\right| < \frac{x|\cos x| + \sin|x|}{x^2} < \frac{x+1}{x^2} \leq 0.11$$

n	x_n^*	p_n^*	$2L\Delta_n$	x_n'	x_n''	p_n
1	12.056	−0.281	0.240	10.963	13.149	−0.161
2	10.963	−0.161	0.070	10.646	11.280	−0.126
3	13.149	−0.161	0.203	12.227	14.701	−0.096
4	10.646	−0.126	0.038	10.474	10.818	−0.107
5	11.280	−0.126	0.041	11.094	11.466	−0.106
6	10.474	−0.107	0.024	10.364	10.584	−0.095
7	10.818	−0.107	0.160	10.745	10.891	−0.099
8	11.094	−0.106	0.016	11.020	11.168	−0.098
9	11.466	−0.106	0.028	11.338	11.594	−0.092
10	10.891	−0.099	$0.008 < \varepsilon$			

Лекция 5

10 марта

6 Минимизация функций многих переменных

6.1 Постановка задачи

Необходимо найти $x^* = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{pmatrix}^\mathsf{T} \in U \subset E_n$, где U — множество допустимых значений, а E_n — евклидово пространство размера n, при этом $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$.

Примечание.

1. Как и в одномерном случае, задача минимизации эквивалентна задачи максимизации и в общем случае называется задачей поиска экстремума.
2. Если U задается ограничениями на вектор x, то такая задача оптимизации называется задачей поиска условного экстремума.
3. Если $U = E_n$, т.е. не имеет ограничений, то такая задача оптимизации называется задачей поиска безусловного экстремума.
4. Решением задачи поиска экстремума называется пара $(x^*, f(x^*))$.

Определение. Если $f(x^*) \leq f(x) \ \ \forall x \in U$, то x^* называется **глобальным минимумом**.

Определение. Если $\exists \varepsilon > 0 : ||x - x^*|| < \varepsilon \Rightarrow f(x^*) \geq f(x)$, то x^* называется **локальным минимумом**.

Примечание.

$$||x|| = \sqrt{\sum_i x_i}$$

Определение. Поверхностью уровня функции $f(x)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянное значение.

Определение. Градиентом $\nabla f(x)$ непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ в x называется:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Примечание. Градиент направлен по нормали к поверхности уровня, т.е. перпендикулярно к касательной плоскости, проведенной в точке x в сторону наибольшего возрастания функции.

Определение. Матрица Гессе $\mathbf{H}(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой в точке x функции $f(x)$ называется матрица частных производных производных второго порядка, вычисленных в данной точке.

$$\mathbf{H}(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix}$$

1. $\mathbf{H}(x)$ симметрична, имеет размер $n \times n$.
2. Можно определить антиградиент — вектор, равный по модулю градиенту и направленный противоположно. Антиградиент указывает в сторону наибольшего убывания $f(x)$.
3. $\Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = \nabla f(x)^\mathsf{T} \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x + o(||\Delta x||^2)$, где $o(||\Delta x||^2)$ есть сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго. Можем заметить, что $\Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x$ — квадратичная форма.

Определение. Квадратичная форма $\Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x$[1] называется:

- Положительно определенной, если $\forall \Delta x \neq 0 \;\; \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x > 0$
- Отрицательно определенной, если $\forall \Delta x \neq 0 \;\; \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x < 0$
- Положительно полуопределенной, если $\forall \Delta x \;\; \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x \geq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$
- Отрицательно полуопределенной, если $\forall \Delta x \;\; \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x \leq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$
- Неопределенной, если $\exists \Delta x, \Delta \tilde{x} : \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x > 0, \Delta \tilde{x}^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta \tilde{x} < 0$
- Тождественно равной нулю, если $\forall \Delta x \;\; \Delta x^\mathsf{T} \mathbf{H}(x) \Delta x = 0$

[1] и соответствующая ей матрица $\mathbf{H}(x)$

6.2 Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций

Определение. Пусть $x, y \in E_n$, множество точек вида $\{z\} \subset E_n : z = \alpha x + (1-\alpha)y$, т.е. z это отрезок $[x, y]$.

Определение. $U \subset E_n$ выпуклое, если вместе с точками $x, y \in U$ оно содержит весь отрезок z.

Определение. Функция $f(x)$, заданная на выпуклом множестве $U \subset E_n$, называется:

- **выпуклой**, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in [0,1] \;\; f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$$

- **строго выпуклой**, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in (0,1) \;\; f(\alpha x + (1-\alpha)y) < \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$$

- **сильно выпуклой** с константой $l > 0$, если:

$$\forall x, y \in U, \alpha \in [0,1] \;\; f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) - \frac{l}{2}\alpha(1-\alpha)||x-y||^2$$

Свойства.

1. Функция $f(x)$ выпуклая, если её график целиком лежит не выше отрезка, соединяющего две её произвольные точки.
2. Функция $f(x)$ строго выпуклая, если её график целиком лежит ниже отрезка, соединяющего две её произвольные, но не совпадающие точки.[2].
3. Если функция сильно выпуклая, то она одновременно строго выпуклая и выпуклая.
4. Если функция строго выпуклая, то она выпуклая.
5. Выпуклость функции можно определить по $\mathbf{H}(x)$:
   - Если $\mathbf{H}(x) \geq 0 \;\; \forall x \in E_n$, то $f(x)$ выпуклая.
   - Если $\mathbf{H}(x) > 0 \;\; \forall x \in E_n$, то $f(x)$ строго выпуклая.
   - Если $\mathbf{H}(x) \geq lE$[3] $\;\; \forall x \in E_n$, то $f(x)$ сильно выпуклая.

Свойства (выпуклых функций).

1. Если $f(x)$ — выпуклая функция на множестве U, то всякая точка локального минимума — глобальный минимум на U.

[2] Пример будет на следующей лекции
[3] единичная матрица

2. Если выпуклая функция достигает своего минимума в двух различных точках, то она достигает минимума во всех точках отрезка, соединяющего эти точки.
3. Если $f(x)$ строго выпуклая функция на множестве U, то она может достигать своего глобального минимума на U не более чем в одной точке.

6.3 Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума

6.3.1 Необходимое условие экстремума первого порядка

Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума[4] $f(x)$ на E_n и $f(x)$ дифференцируема в точке x^*. Тогда $\nabla f(x)$ в точке x^* равен нулю: $\nabla f(x^*) = 0$ или $\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0 \ \ \forall i \in 1 \dots n$. Точка x^* называется **стационарной**.

6.3.2 Необходимое условие экстремума второго порядка

Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума[5] $f(x)$ на E_n и $f(x)$ дважды дифференцируема в точке x^*. Тогда $\mathbf{H}(x^*)$ положительно полуопределена или отрицательно полуопределена.

6.3.3 Достаточное условие экстремума

Пусть $f(x)$ в $x^* \in E_n$ дважды дифференцируема, $\nabla f(x^*) = 0$ и $\mathbf{H}(x) > 0$ (или $\mathbf{H}(x) < 0$). Тогда x^* — точка локального минимума[6] $f(x)$ на E_n.

6.3.4 Проверка выполнений условий экстремума

- Вычисление угловых миноров $\mathbf{H}(x)$
- Вычисление главных миноров $\mathbf{H}(x)$

Есть два способа это сделать:

1. Исследование положительной или отрицательной определенности угловых и главных миноров $\mathbf{H}(x)$.
2. Анализ собственных значений $\mathbf{H}(x)$.

[4] или максимума
[5] или максимума
[6] или максимума

Лекция 6

17 марта

6.3.5 Критерии Сильвестра проверки достаточных условий экстремума

1. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) > 0$ и x^* являлась точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы **угловые** миноры были строго положительными, т.е. $\Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0 \dots \Delta_n > 0$.
2. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) < 0$ и x^* являлась точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки **угловых** миноров чередовались, т.е. $\Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0 \dots (-1)^n \Delta_n > 0$

6.3.6 Критерии Сильвестра проверки необходимых условий экстремума

1. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) \geq 0$ и x^* мог быть точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы **главные** миноры были положительными, т.е. $\Delta_1 \geq 0, \Delta_2 \geq 0, \dots \Delta^n \geq 0$
2. Для того, чтобы $\mathbf{H}(x^*) \leq 0$ и x^* мог быть точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки **главных** миноров чередовались, т.е. $\Delta_1 \leq 0, \Delta_2 \geq 0, \dots (-1)^n \Delta^n \geq 0$

Определение. Собственные значения λ_i матрицы $\mathbb{H}(x^*)$ находятся как корни характеристического уравнения $|H(x^*) - \lambda E| = 0$

Если $H(x)$ — вещественная, симметричная матрица, то λ_i тоже вещественные.

6.4 Квадратичные функции

Определение. Функция вида

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{n} b_j x_j + c$$

называется **квадратичной функцией** n переменных.

Положим $a_{ij} = a_{ji}$[1], тогда a_{ij} задаёт симметричную матрицу A.

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

, где $b = \begin{pmatrix} b_1 & \dots & b_n \end{pmatrix}^\mathsf{T} \in E_n$ — вектор коэффициентов, $x = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \end{pmatrix}^\mathsf{T}$

Свойства (квадратичных функций).

1. $\nabla f(x) = Ax + b$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j + \sum_{j=1}^{n} b_j x_j + c\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(a_{ik} + a_{ki})x_i + b_k \\ &= \sum_{i=1}^{n} a_{ki}x_i + b_k\end{aligned}$$

2. $\mathbf{H}(x) = A$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_l \partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right) = \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ki}x_i + b_k\right) = a_{kl}$$

3. Квадратичная функция $f(x)$, для которой выполнено (3), с положительно определенной матрицей A сильно выпуклая, т.к. $\mathbf{H}(x) = A$ — симметричная и положительная определенная, а следовательно $\lambda_i > 0$ и $\exists$ ортонормированный базис из собственных векторов этой матрицы. В этом базисе:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad A - lE = \begin{pmatrix} \lambda_1 - l & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 - l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n - l \end{pmatrix}$$

В этом базисе все угловые миноры матрицы A и матрицы $A - lE$ положительны при достаточно малом $l : 0 < l < \lambda_{\min} \Rightarrow f$ сильно выпуклая.

[1] На лекции было дано $a_{ij} = a_{ij} + a_{ji}$, но это не похоже на правду, т.к. тогда $a_{ji} = 0 \ \forall i, j$. Нулевая матрица действительно симметрична, но вряд ли это подразумевалось.

6.5 Общие принципы многомерной оптимизации

Алгоритмы многомерной оптимизации обычно используют итерационную процедуру, описываемую следующим образом: $x^{k+1} = \Phi(x^k, x^{k-1} \dots x^0), x^0 \in E_n$. Эти алгоритмы строят последовательность промежуточных результатов $\{x_k\}$, которая обладает следующими свойствами:

$$\begin{cases} \lim\limits_{k \to +\infty} f(x^k) = f^* = \min\limits_{E_n} f(x), & \text{если } U^* \neq \varnothing \\ \lim\limits_{k \to +\infty} f(x^k) = f^* = \inf\limits_{E_n} f(x), & \text{если } U^* = \varnothing \end{cases} \tag{4}$$

, где U^* — множество точек глобального минимума функции $f(x)$.

Определение. Если для $\{x^k\}$ выполняется условие (4), то эта последовательность называется **минимизирующей**.

Определение. Если для $U^* \neq \varnothing$ выполняется условие $\lim_{k \to +\infty} \rho(x^k, U^*) = 0$, то $\{x^k\}$ **сходится** к множеству U^*

Определение (расстояние от точки до множества)**.** $\rho(x, U) = \inf_{y \in U} \rho(x, y)$

Если U^* состоит из одной точки x^*, то для $\{x^k\}$, сходящейся к U^*, $\lim_{k \to +\infty} x^k = x^*$. Минимизирующая последовательность может и не сходиться к точке минимума.

Теорема 1 (Вейерштрасса)**.** Если $f * x$ непрерывна в E_n и множество $U^\alpha = \{x : f(x) \leq \alpha\}$ для некоторого α непусто и ограничено, то $f(x)$ достигает глобального минимума в E_n.

6.6 Скорость сходимости минимизирующей последовательности

Определение. $\{x^k\}$ сходится к точке x^* **линейно** *(со скоростью геометрической прогрессии)*, если

$$\exists q \in (0, 1) : \rho(x^k, x^*) = q\rho(x^{k-1}, x^*)$$

, т.е. $\rho(x^k, x^*) \leq q^k \rho(x^0, x^*)$

Определение. Сходимость называется **сверхлинейной**, если

$$\rho(x^k, x^*) \leq q_k \rho(x^{k-1}, x^*)$$

и $q_k \to +0$ при $k \to +\infty$

Определение. Сходимость называется **квадратичной**, если

$$\rho(x^k, x^*) \leq (c\rho(x^{k-1}, x^*))^2, c > 0$$

Критерий окончания итерационного процесса:

1. $\rho(x^{k+1}, x^k) < \varepsilon_1$
2. $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| < \varepsilon_2$

3. $||\nabla f(x^k)|| < \varepsilon_3$

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \tag{5}$$

, где p^k — **направление поиска** из x^k в x^{k+1}, а α_k — **величина шага**. Алгоритмы, которые мы будем рассматривать, различаются этими двумя величинами.

Определение. В итерационном процессе (5) производится **исчерпывающий спуск**, если величина шага α_k находится из решения одномерной задачи минимизации

$$\Phi_k(\alpha) \to \min_\alpha, \Phi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k)$$

Теорема 2. Если функция $f(x)$ дифференцируема в E_n, то в итерационном процессе (5) с выбором шага с исчерпывающим спуском для любого $k \geq 1$ выполняется следующее условие:

$$\left\langle \nabla f(x^{k+1}), p^k \right\rangle = 0$$

Доказательство. Для $\Phi_k(\alpha)$ необходимое условие минимума функции:

$$\frac{d\Phi_k(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f(x^{k+1})}{\partial x_j} \frac{dx_j^{k+1}}{d\alpha} = 0$$

Учитывая, что $x_j^{k+1} = x_j^k + \alpha p_j^k$, получаем, что $\frac{dx_j^{k+1}}{d\alpha} = p_j^k$ □

Теорема 3. Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle + c$ величина α_k исчерпывающего спуска в итерационном процессе (5) равна:

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k\rangle} = -\frac{\left\langle Ax^k + b, p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k\rangle}$$

Доказательство.

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$$
$$Ax^{k+1} + b = Ax^k + b + \alpha_k Ap^k$$
$$\nabla f(x^{k+1}) = \nabla f(x^k) + \alpha_k Ap^k$$

$$\left\langle \nabla f(x^{k+1}), p^k \right\rangle = 0$$
$$\left\langle \nabla f(x^k) + \alpha_k Ap^k, p^k \right\rangle = 0$$
$$\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle + \left\langle \alpha_k Ap^k, p^k \right\rangle = 0$$
$$\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle + \alpha_k \left\langle Ap^k, p^k \right\rangle = 0$$
$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k\rangle}$$

□

Лекция 7

22 марта *(дополнительная лекция)*

Определение. Направление вектора p^k называется **направлением убывания** функции $f(x)$ в точке x^k, если при всех достаточно малых положительных α выполняется неравенство $f(x^k + \alpha p^k) < f(x^k)$

Теорема 4 (достаточное условие направления убывания)**.** Пусть функция $f(x)$ дифференцируема в точке x^k. Если вектор p^k удовлетворяет условию $\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle < 0$, то направление вектора p^k является направлением убывания.

Доказательство. Из свойства дифференцируемости функции и условия теоремы следует, что

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) = \left\langle \nabla f(x^k), \alpha p^k \right\rangle + \mathcal{o}(\alpha) = \alpha(\nabla f(x^k), p^k + \frac{\mathcal{o}(\alpha)}{\alpha}) < 0$$

при всех достаточно малых $\alpha > 0$, т.е. p^k задает направление убывания $f(x)$ в точке x^k. □

Геометрическая интерпретация: $\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle < 0 \Rightarrow p^k$ составляет тупой угол с $\nabla f(x^k)$.

Рассмотрим $f(x)$, дифференцируемую в E_n и запишем итерационную процедуру минимизации:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \tag{6}$$

, где p^k определяется с учетом информации о частных производных, а величина α_k такова, что:

$$f(x^{k+1}) < f(x^k) \tag{7}$$

Условие остановки итерационного процесса: $||\nabla f(x^k)|| < \varepsilon$.

6.7 Метод градиентного спуска

Предпололжим, что в (6) $p^k = -\nabla f(x^k)$. Если $\nabla f(x^k) \neq 0$, то $\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle < 0$, следовательно p^k — направление убывания $f(x)$, причём в малой окрестности точки x^k направление p^k обеспечивает наискорейшее **убывание** функции. Таким образом, $\exists \alpha_k > 0$, такое что (7) выполнено.

Алгоритм метода:

1. Выбрать $\varepsilon > 0, \alpha > 0, x \in E_n$, вычислить $f(x)$.
2. Вычислить $\nabla f(x)$. Проверить условие $||\nabla f(x)|| < \varepsilon$. Если оно выполнено, то завершить процесс, иначе перейти к шагу 3.
3. Найти $y = x - \alpha \nabla f(x)$ и $f(y)$. Если $f(y) < f(x)$, то положить $x = y, f(x) = f(y)$ и перейти к шагу 2, иначе — к 4.
4. Положить $\alpha = \frac{\alpha}{2}$ и перейти к шагу 3.

Примечание. В окрестности стационарной точки величина градиента мала, вследствие чего сходимость процесса замедляется. Поэтому в (6) иногда полагают

$$p^k = -\frac{\nabla f(x^k)}{||\nabla f(x^k)||}$$

Теорема 5. Пусть симметричная матрица A квадратичной функции $f(x)$ положительно определена, l и L — наименьшее и наибольшее собственные значения A $(0 < l \leq L)$. Тогда при любых $\alpha \in \left(0, \frac{2}{L}\right)$ и $x^0 \in E_n$ (6) сходится к единственной точке глобального минимума x^* функции $f(x)$ линейно:

$$\rho(x^k, x^*) \leq q^k \rho(x^0, x^*)$$

Доказательство. Т.к. A положительно определена, то $f(x)$ сильно выпукла. Следовательно точка x^* существует и единственна. $\nabla f(x^*) = 0$, тогда:

$$\nabla f(x^k) = Ax^k + b = Ax^k + b - Ax^* - b = A(x^k - x^*)$$

$$\begin{aligned} ||x^k - x^*|| &= ||x^{k-1} - \alpha \nabla f(x^{k-1}) - x^*|| \\ &= ||x^{k-1} - x^* - \alpha A(x^{k-1} - x^*)|| \\ &= ||(E - \alpha A)(x^{k-1} - x^*)|| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} ||x^k - x^*|| &\leq ||E - \alpha A|| \cdot ||x^{k-1} - x^*|| \\ &\leq q||x^{k-1} - x^*|| \\ &\leq q^k ||x^0 - x^*|| \end{aligned}$$

□

q — оценка нормы матрицы через величину её собственных значений: $||E - \alpha A|| \leq q = \max\{|1 - \alpha l|, |1 - \alpha L|\}$. Величина q принимает наименьшее значение при $q^* = \frac{L-l}{L+l}$ при $\alpha = \alpha^* = \frac{2}{L+l}$

Доказательство. Т.к. $l < L$, то $1 - \alpha l = -(1 - \alpha L)$. Тогда $q = 1 - \alpha l = 1 - \frac{2l}{L+l} = \frac{L-l}{L+l}$ $\square$

От соотношения l и L существенно зависит число итераций градиентного метода при минимизации выпуклой квадратичной функции.

Пример ($L = l > 0$). $f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \min, x^0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}^\mathsf{T}, \alpha = \alpha^*$

Решение:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow l = L = 2 \Rightarrow \alpha^* = \frac{2}{2+2} = \frac{1}{2}$$

$$x^1 = x^0 - \frac{1}{2}\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \end{pmatrix}^\mathsf{T}$$

Несложно заметить, что $x^1 = x^*$.

Таким образом, точка минимума нашлась за один шаг.

При $l = L$ линии уровня $f(x)$ — концентрические окружности. При $L \gg l > 0$ линии уровня $f(x)$ — эллипсы:

Пример ($L \gg l > 0$). $f(x) = x_1^2 + 100x_2^2 \to \min, x_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}^\mathsf{T}, \alpha = \alpha^*$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 200 \end{pmatrix} \Rightarrow l = 2, L = 200$$

$$-\nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} -2 & -200 \end{pmatrix}^\mathsf{T}$$

$x^* - x^0 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \end{pmatrix}^\mathsf{T}$ — направление к точке глобального минимума, сильно отличается от направления спуска, минимизирующая последовательность сходится зигзагообразно.

Определение. Число обусловленности для симметричной положительно определенной матрицы: $\mu = \frac{L}{l}$. Оно характеризует степень вытянутости линий уровня $f(x) = C$.

- Если μ велико, то линии уровня сильно вытянуты, функция имеет овражный характер, т.е. резко меняется по одним направлениям и слабо по другим. В таком случае задачу минимизации называют плохо обусловленной.
- Если $\mu \sim 1$, линии уровня близки к окружности и задача называется хорошо обусловленной.

6.8 Метод наискорейшего спуска

Идея: после вычисления в начальной точке градиента функции делает в направлении антиградиента не малый шаг, а передвигается до тех пор, пока функция убывает. Достигнув точки минимума на выбранном направлении, повторяет описанную процедуру.

α_k находится из решения задачи одномерной оптимизации:

$$\Phi_k(\alpha) \to \min, \Phi_k(\alpha) = f(x^k - \alpha \nabla f(x^k)), \alpha > 0 \tag{8}$$

Алгоритм метода:

1. Выбрать $\varepsilon > 0, x^0 \in E_n$, вычислить $f(x^0)$
2. Вычислить $\nabla f(x)$. Проверить условие $||\nabla f(x)|| < \varepsilon$. Если оно выполнено, то завершить процесс, иначе перейти к шагу 3.
3. Решить задачу (8) для $x^k = x$, т.е. найти α^*. Положить $x = x - \alpha^* \nabla f(x)$, перейти к шагу 2.

Определение. Ненулевые вектора $p^1 \dots p^k$ называются **сопряженными** относительно матрицы A размера $n \times n$ или A-**ортогональными**, если $\langle Ap^i, p^j \rangle = 0$, если $i \neq j$.

Система из n векторов $p^1 \dots p^n$, сопряженных относительно положительно определенной матрицы A, линейно независима и образует базис в E_n.

Рассмотрим минимизацию квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x \rangle + \langle b, x \rangle + c$ в E_n, где A положительно определенная и итерационный процесс (6), где p^k — A-ортогональные.

Если в таком итерационном процессе на каждом шаге исчерпывающий спуск, то:

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^0), p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

Доказательство.

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k = x^0 + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i p^i$$

$$\nabla f(x) = Ax + b$$

$$\nabla f(x^k) = \nabla f(x^0) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i A p^i$$

Домножим на p^k:

$$\left\langle \nabla f(x^k) \right\rangle = \left\langle \nabla f(x^0), p^k \right\rangle + \left\langle \alpha_k A p^k, p^k \right\rangle$$

$$\left\langle \nabla f(x^0), p^k \right\rangle + \left\langle \alpha_k A p^k, p^k \right\rangle = 0$$

Т.к. A положительно определено, $\left\langle Ap^k, p^k \right\rangle > 0$ и для α_k:

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^0), p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

□

Теорема 6. Последовательный исчерпывающий спуск по A-ортогональным направлениям приводит квадратичной формы не более чем за n шагов.

Лекция 8

24 марта

6.9 Метод сопряженных градиентов

$$p^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k p^k \tag{9}$$

β_k выбираются так, чтобы получалась последовательность A-ортогональных векторов $p^0, p^1 \ldots$. Из условия $\left\langle Ap^{k+1}, p^k \right\rangle = 0$ имеем:

$$\beta_k = \frac{\left\langle A\nabla f(x^{k+1}, p^k) \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

Для квадратичной функции:

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle \nabla f(x^k), p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

Вышеуказанный итерационный процесс дает точки $x^0 \ldots x^k$ и векторы $p^0 \ldots p^k$, такие, что если $\nabla f(x^i) \neq 0$ при $0 \leq i < k \leq n-1$, то векторы $p^0 \ldots p^k$ A-ортогональны, а $\nabla f(x^0) \ldots \nabla f(x^i)$ взаимно ортогональны.

Т.к. в (9) p^k A-ортогональны, то метод гарантирует нахождение точки минимума сильно выпуклой функции не более, чем за n шагов.

Следующие формулы описывают итерационный процесс метода сопряженных градиентов:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad x^0 \in E_n, p^0 = -\nabla f(x^0)$$

$$f(x^k + \alpha_k p^k) = \min_{\alpha > 0} f(x^k + \alpha p^k)$$

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

$$\beta_k = \frac{||\nabla f(x^{k+1})||^2}{||\nabla f(x^k)||^2}$$

Можем заметить, что мы не используем матрицу A, поэтому этот метод может применяться для минимизации не только квадратичных функций. Но этот метод может не находить точку минимума не квадратичной функции за конечное число шагов.

Вектора p^k вообще говоря могут не образовывать A-ортогональную систему, вследствие чего реализация этого метода будет сопровождаться неизбежными накапливающимся погрешности, из-за чего сходимость метода может нарушиться. Чтобы с этим бороться, через каждые N шагов производят обновление метода, т.е. $\beta_{m \cdot N} = 0, m \in \mathbb{N}$, где $m \cdot N$ называются моментами обновления метода *(рестарта)*, а N обычно принимают за n — размерность пространства E_n.

6.10 Метод стохастического градиентного спуска

Этот метод используется, когда дано множество пар (x, y), называемых тренировочными наборами. Это множество разделяется на K подмножеств размера M, называемых minibatch.[1]

$$X^{(k)} = \{x_i \mid i = M_k, \dots (M_k + M - 1)\}$$
$$Y^{(k)} = \{y_i \mid i = M_k, \dots (M_k + M - 1)\}$$
$$L^{(k)}(w) = \sum_{i=0}^{M} L(w, x_{M_k+i}, y_{M_k+i})$$

Есть большие итерации по p, называемые **эпохами** и малые итерации $w_p^{(k+1)} = w_p^{(k)} - \eta \cdot \nabla L^{(k)}(w_p^{(k)}), w_{p+1}^{(0)} = w_p^{(K)}$, где $\eta = \text{const}$[2]. При переходе от одной эпохе к другой minibatch-и случайно перемешиваются.

6.10.1 Adagrad

Примечание. Куда более адекватная статья по adagrad и прочим модификациям стохастического спуска: https://habr.com/ru/post/318970/

Примечание. Лучшая модификация SGD — Adam, если не хочется думать, надо всегда использовать его.

Идея алгоритма — в покоординатном изменении η. Пусть $\eta_p = \begin{pmatrix} \eta_p^{(1)} & \dots & \eta_p^{(d)} \end{pmatrix}$, η_0 — константный вектор $\eta_0^{(i)} = \eta \ \ \forall i$.

Вспомогательные данные:

$$\nabla L(w_p) = \begin{pmatrix} g_p^{(1)} & \dots & g_p^{(d)} \end{pmatrix} \quad G_p^{(i)} = \sum_{j=1}^{p} (g_j^{(i)})^2$$

[1] Проще говоря, этот метод используется в машинном обученнии
[2] И называется learning rate

Тогда пусть

$$\eta_p^{(i)} = \frac{\eta}{\sqrt{G_p^{(i)} + \epsilon}}$$

, где $\epsilon \approx 10^{-8}$ — сглаживающий параметр, который позволяет избежать деления на 0.

Тогда правило перехода будет:

$$w_{p+1} = w_p - \eta_p \odot \nabla L(w_p)$$

, где $\odot$ — поэлементное умножение векторов.

6.11 Метод покоординатного спуска

Алгоритм метода:

1. Фиксируем значения всех переменных вектора $x = \begin{pmatrix} x_1 & \dots & x_n \end{pmatrix}$, кроме x_i.
2. $f(x_i) \to \min$ методом одномерной оптимизации *(наиболее популярный метод — золотого сечения).*
3. Проверка критерия остановки:
   - $||x^{k+1} - x^k|| \leq \varepsilon_1$
   - $||f(x^{k+1}) - f(x^k)|| \leq \varepsilon_2$

Лекция 9

31 марта

7 Форматы хранения матриц

Определение. Матрица с большим количеством нулевых элементов называется **разреженной**. Такие матрицы хранятся особым образом.

Определение. Не разреженная матрица называется **плотной**.

Формат записи матриц зависит от алгоритма, который будет использовать данную матрицу. Наиболее распространены следующие 4 разреженных формата:

1. Диагональный
2. Ленточный
3. Профильный
4. Разреженный

Мы будем рассматривать эти форматы только в применении к квадратным матрицам. Первые два формата используются реже и мы не будем их рассматривать в лабораторных работах.

Характеристики форматов:

- Учитывается ли симметрия матрицы.
- Используются ли отдельно верхний и нижний треугольники матрицы.
- Требуется ли ускоренный доступ к строкам или столбцам матрицы.

7.1 Диагональный формат

Этот формат используется, когда все ненулевые элементы матрицы находятся на относительно небольшом числе диагоналей.

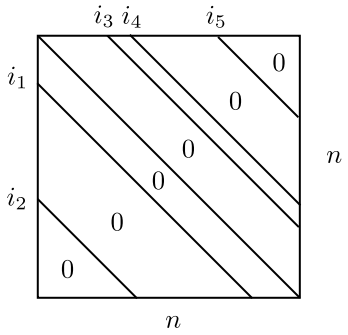


Рис. 9.1: Матрица с ненулевыми элементами на диагоналях, $m = 5$

Матрица хранится в виде плотной матрицы $n \times m$, где n — размерность исходной матрицы, а m — количество ненулевых диагоналей. Также необходимо хранить одномерный массив размерностью $m - 1$, где для каждой диагонали указан сдвиг относительно главной диагонали. В примере значения этого массива $(-i_2, -i_1, i_3, i_4, i_5)$.

7.2 Ленточный формат

Этот формат используется, когда все ненулевые элементы матрицы расположены на диагоналях, прилегающих к главной диагонали, т.е. $a_{ij} = 0$, если $|i - j| > k$. При этом k называется **полушириной**, а ширина ленты $m = 2k + 1$.

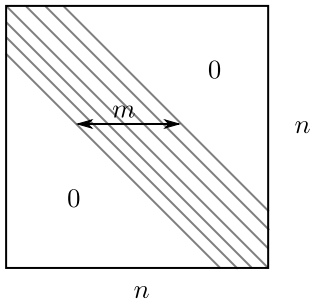
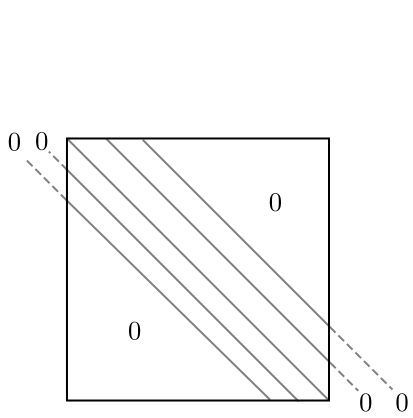


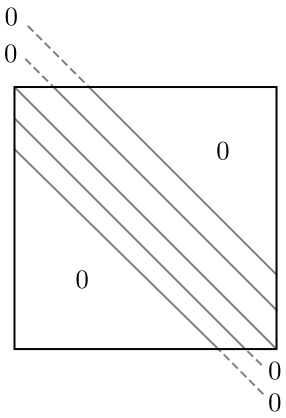
Рис. 9.2: Матрица ленточного типа

Хранить такие матрицы в виде m массивов различных длин не представляется возможным, т.к. требуется быстрый доступ к элементам матрицы.

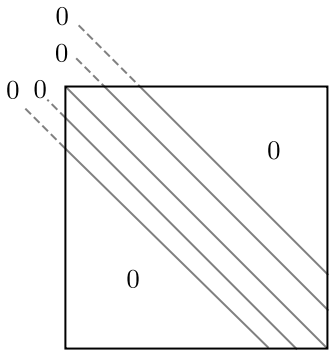
Иногда главную диагональ хранят отдельно, в зависимости от алгоритма.



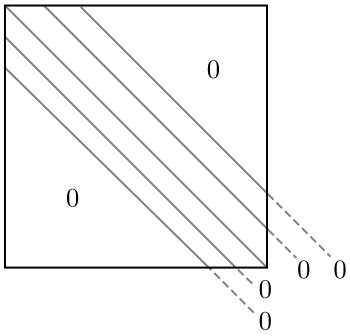
(a) Строчное хранение



(b) Столбцовое хранение



(c) Строчно-столбцовое хранение



(d) Столбцово-строчное хранение

Рис. 9.3: Способы хранения матрицы в ленточном формате

7.3 Профильный формат

Профильные форматы хранения матриц используется, когда матрица не обладает определенной структурой и ненулевые элементы расположены в произвольном порядке, но при этом они сосредоточены у главной диагонали, так что в строке можно выделить **профиль** — часть строки от первого ненулевого элемента в строке до диагонального элемента.

Матрицы ленточного формата — матрицы профильного формата с фиксированным профилем.

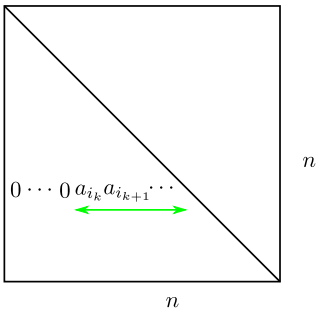


Рис. 9.4: Матрица профильного типа. Зеленым — профиль строки i

Используемые структуры:

- Вещественный массив di[n]
- Вещественные массивы:
  - al — элементы нижнего треугольника по строкам
  - au — элементы верхнего треугольника по столбцам.
- Целочисленный массив ia — информация о профиле: ia[k] = индекс *(в нумерации с 1)*, с которого начинаются элементы k-той строки или столбца в массивах al или au.

ia[n+1] = индекс первого незанятого элемента в массивах al и au.

ia[i+1] - ia[i] — значение профиля i-той строки *(столбца)* нижнего *(верхнего)* треугольника.

ia[1] = ia[2] = 1.

Примечание. Если матрица симметрична по значениям, то al = au.

Пример.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & & & & & & & \\ & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & & & \\ & a_{32} & a_{33} & 0 & a_{35} & a_{36} & & \\ & a_{42} & 0 & a_{44} & a_{45} & 0 & a_{47} & \\ & & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} & 0 & a_{58} & a_{59} \\ & & a_{63} & 0 & a_{65} & a_{66} & 0 & a_{68} & 0 \\ & & & a_{74} & 0 & 0 & a_{77} & 0 & a_{79} \\ & & & & a_{85} & a_{86} & 0 & a_{88} & 0 \\ & & & & a_{95} & 0 & a_{97} & 0 & a_{99} \end{bmatrix}$$

$$di = \{a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{44}, a_{55}, a_{66}, a_{77}, a_{88}, a_{99}\}$$

$$ia = \{1, 1, 1, 2, 4, 6, 9, 12, 15, 19\}$$

$$al = \{a_{32}, a_{42}, 0, a_{53}, a_{54}, a_{63}, 0, a_{65}, a_{74}, 0, 0, a_{85}, a_{86}, 0, a_{95}, 0, a_{97}, 0\}$$

$$au = \{a_{23}, a_{24}, 0, a_{35}, a_{45}, a_{36}, 0, a_{56}, a_{47}, 0, 0, a_{58}, a_{68}, 0, a_{59}, 0, a_{79}, 0\}$$

Первый элемент для 6-ой строки: $al[ia[6]] = al[6] = a_{63}$

Профиль 6-ой строки: $ia[7] - ia[6] = 9 - 6 = 3$.

7.4 Разреженный формат

Этот формат бывает:

- строчным

- столбцовым
- смешанным: строчно-столбцовым или столбцово-строчным.

Лекция 10

7 апреля

Рассмотрим строчно-столбцовый формат.

Используемые структуры:

1. Вещественный массив di — диагональные элементы.
2. Вещественные массивы al *(по строкам)*, au *(по столбцам)*, хранящие внедиагональные элементы нижнего или верхнего треугольника соответственно.
3. Целочисленный массив ja — номера столбцов *(строк)* хранимых внедиагональных элементов нижнего или верхнего треугольника матрицы. ja[j] — номер столбца для al[j], номер строки для au[j].
4. Целочисленный массив ia, где ia[k] равен индексу *(в нумерации с 1)*, с которого начинаются элементы k-той строки или столбца в массивах al, au, ja.

Размерность ja, al, au есть ia[n+1]-1.

ia[i] - ia[i] — количество хранимых внедиагональных элементов i-той строки *(столбца)* нижнего *(верхнего)* треугольника.

$ia[1] = ia[2] = 1$.

Пример.

$$\begin{bmatrix}
a_{11} & & & & & & & & \\
 & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & & & & \\
 & a_{32} & a_{33} & 0 & a_{35} & a_{36} & & & \\
 & a_{42} & 0 & a_{44} & a_{45} & 0 & a_{47} & & \\
 & & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} & 0 & a_{58} & a_{59} \\
 & & a_{63} & 0 & a_{65} & a_{66} & 0 & a_{68} & 0 \\
 & & & a_{74} & 0 & 0 & a_{77} & 0 & a_{79} \\
 & & & & a_{85} & a_{86} & 0 & a_{88} & 0 \\
 & & & & a_{95} & 0 & a_{97} & 0 & a_{99}
\end{bmatrix}$$

$$di = \{a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{44}, a_{55}, a_{66}, a_{77}, a_{88}, a_{99}\}$$

$$ia = \{1, 1, 1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12\}$$

$$ja = \{2, 2, 3, 4, 3, 5, 4, 5, 6, 5, 7\}$$

$$al = \{a_{32}, a_{42}, a_{53}, a_{54}, a_{63}, a_{65}, a_{74}, a_{85}, a_{86}, a_{95}, a_{97}\}$$

$$au = \{a_{23}, a_{24}, a_{35}, a_{45}, a_{36}, a_{56}, a_{47}, a_{58}, a_{68}, a_{59}, a_{79}\}$$

Для 6-ой строки: $ia[6] = 5$ — начало 6-ой строки в массивах ja и al. $ia[6+1] - ia[6] = 7 - 5 = 2$ — количество элементов в 6-ой строке.

Первый элемент: $ja[ia[6]] = ja[5] = 3$, второй элемент: $ja[ia[6]+1] = ja[5+1] = 5$.

8 Решение СЛАУ. Метод Гаусса.

СЛАУ:

$$\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
\vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
\end{cases}$$

То же самое, но в матричной форме:

$$Ax = b$$

, где:

- $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{n}$ — вещественные числа
- $b = (b_1 \dots b_n)^\mathsf{T}$
- $x = (x_1 \dots x_n)^\mathsf{T}$

Эффективность способов решения СЛАУ зависит от структуры и свойств матрицы A, т.е. от размера, обусловленности, симметричности, заполненности и от её профиля.

Рассмотрим прямой ход метода Гаусса. Первый шаг — домножение уравнений на коэффициенты $-\frac{a_{21}}{a_{11}}, -\frac{a_{31}}{a_{11}} \cdots - \frac{a_{n1}}{a_{11}}$:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{cases}$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}}a_{1j} \quad b_i^{(1)} = b_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}}b_1$$

На $n-1$ шаге метода система будет приведена к следующему виду:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \vdots \\ a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \end{cases}$$

Дальше производятся обратный ход метода Гаусса:

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}$$

$$\vdots$$

$$x_2 = \frac{b_2^{(1)} - a_{23}^{(1)}x_3 - \cdots - a_{2n}^{(1)}x_n}{a_{22}^{(1)}}$$

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n}{a_{11}}$$

В общем виде:

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}}\left(b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k-1)} \cdot x_j\right)$$

Алгоритм:

```
for k = 1...n-1:
    for i = k+1...n:
        t_ik = a_ik / a_kk
        b_i = b_i - t_ik * b_k
```

5 for $j = k + 1 \dots n$
6 $a_{ij} = a_{ij} - t_{ik} \cdot a_{kj}$
7 $x_n = b_n / a_{nn}$
8 for $k = n - 1 \dots 1$
9 $x_k = \left(b_k - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj} \cdot x_j\right) / a_{kk}$

У этого алгоритма есть проблема — арифметика компьютеров не точна. В частности, если a_{kk} мало, то при делении можно получить немалую ошибку. Чтобы бороться с этим, есть модификация:

8.1 Модификация метода Гаусса *(постолбцовый выбор главного элемента)*

Необходимо найти $m \geq k$, где k — номер рассматриваемого шага, а $|a_{mk}| = \max_{i \geq k}\{|a_{ik}|\}$.

- Если $a_{mk} = 0 (\approx \varepsilon)$, однозначного решения нет, остановка алгоритма.
- Если $a_{mk} \neq 0$, меняем местами b_k и b_m; a_{kj} и a_{mj} при $j = k \dots n$.

При такой замене порядок x_i в общем векторе решения не меняются. Есть и другие модификации, которые его меняют. В таких алгоритмах необходимо поддерживать матрицу перестановок неизвестных и умножить ответ на эту матрицу.

Лекция 11

14 апреля

Прямые методы основаны на разложениях матрицы L, например:

- LU, где L — нижнетреугольная матрица, а U — верхнетреугольная матрица.
- LL^T — метод квадратного корня
- LDL^T, где $L_{ii} = 1$, D — диагональная матрица.

Мы рассмотрим первый.

9 LU-метод

$$AX = b$$
$$LUx = b$$
$$y := Ux \tag{10}$$
$$Ly = b \tag{11}$$

Таким образом, решение задачи сводится к трём этапам:

1. По A получить L, U.
2. Решить (11) прямым ходом метода Гаусса, тем самым найти y.
3. Решить (10) обратным ходом метода Гаусса, тем самым найти x.

Основные временные затраты происходят на первом этапе метода.

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & 0 & \cdots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & U_{12} & U_{13} & \cdots \\ 0 & 1 & U_{23} & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Пример. Красным отмечены вычисляемые на данной итерации элементы:

$$\begin{aligned} A_{11} &= L_{11} \\ A_{21} &= L_{21} \\ A_{12} &= L_{11} \cdot U_{12} \\ A_{22} &= L_{21} \cdot U_{12} + L_{22} \\ A_{31} &= L_{31} \\ A_{13} &= L_{11} \cdot U_{13} \\ A_{32} &= L_{31} \cdot U_{12} + L_{32} \\ A_{23} &= L_{21} \cdot U_{13} + L_{22} \cdot U_{23} \\ A_{33} &= L_{31} \cdot U_{13} + L_{32} \cdot U_{23} + L_{33} \end{aligned}$$

9.1 Алгоритм разложения

$L_{11} = A_{11}$, для i от 2 до n:

$$L_{ij} = A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} \cdot U_{kj} \quad j \in \overline{1, i-1}$$

$$U_{ji} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ji} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk} \cdot U_{ki} \right) \quad j \in \overline{1, i-1}$$

$$L_{ii} = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} \cdot U_{ki}$$

$$U_{ii} = 1$$

10 Дополнительные рассуждения о точности получаемого численного решения

10.1 Близкие к нулю главные элементы

Пример.

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 3.901 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Точное решение: $x = (0, -1, 1)^\mathsf{T}$.

Предположим, что мы решаем эту задачу на ЭВМ с десятичной пятиразрядной арифметикой с плавающей точкой.

Решим обычным методом Гаусса без модификаций.

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -1.0 \cdot 10^3 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 6.001 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

$$6.001 \cdot 2.5 \cdot 10^3 = 1.5002 \cdot 10^4 \approx 1.5003 \cdot 10^4$$

$$1.5005 \cdot 10^4 \cdot x_3 = 1.5004 \cdot 10^4$$

$$x_3 = \frac{1.5004 \cdot 10^4}{1.5005 \cdot 10^4} = 0.99993$$

$$x_2 = \frac{1.5 \cdot 10^{-3}}{-1.0 \cdot 10^{-3}} = -1.5$$

$$x_1 = -0.35$$

Итого ошибка очень крупная, 0.5 для одного из элементов. Ошибка возникла на шаге исключения, т.к. не использовалась модификация метода.

10.2 Вектор ошибки и невязка

$$\begin{pmatrix} 0.78 & 0.563 \\ 0.457 & 0.330 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.217 \\ 0.127 \end{pmatrix}$$

$$x^*$$

Арифметика трёхразрядная.

Вычисления опущены.

$$x = (1.71, -1.98)^\mathsf{T}$$

Определение. Невязка $r = b - Ax$.

$r = (-0.00206, -0.00107)^\mathsf{T}$, что, казалось бы, хорошо. Но при этом верное решение $x^* = (1, -1)^\mathsf{T}$ на несколько порядков больше отличается от полученного ответа. Таким образом, невязка не всегда показывается точность полученного решения.

Величина ошибки в решении $\approx$ величина решения $\times \text{cond}(A) \times \varepsilon_{\text{машины}}$, где $\text{cond}(A)$ — число обусловленности[1] A.

Пример. Если $\text{cond}(A) = 10^5, \varepsilon = 10^{-8}$, то в решении три верных разряда.

10.2.1 Векторные нормы

Примеры:

- Евклидова или 2-норма: $||x||_2 = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{1/2}$
- 1-норма или Манхеттенское расстояние: $||x||_1 = \sum\limits_{i=1}^{n} |x_i|$
- $\max$-норма или ∞-норма: $||x||_\infty = \max_i |x_i|$

Условия на норму:

- $||x|| > 0$, если $x \neq 0$
- $||0|| = 0$
- $||cx|| = |c| \cdot ||x|| \ \ \forall c$
- $||x + y|| \leq ||x|| + ||y||$

Если матрица A **вырождена**, то решение уравнения $Ax = b$ может не существовать для одних b и не быть единственным для других b. Если же матрица **почти вырождена**, то малые изменения A и b вызовут большие изменения в x.

Определение.

$$M = \max_x \frac{||Ax||}{||x||} \Rightarrow ||Ax|| \leq M \cdot ||x||$$

$$m = \min_x \frac{||Ax||}{||x||} \Rightarrow ||Ax|| \geq m \cdot ||x||$$

$\frac{M}{m}$ **— число обусловленности матрицы**.

[1] Отношение максимального и минимального собственного числа матрицы.

$$Ax = b$$
$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b$$

Посмотрим, как ошибка в b, обозначенная Δb, влияет на Δx — ошибку в x.

$$||Ax|| = ||b|| \leq M \cdot ||x||$$
$$||A\Delta x|| = ||\Delta b|| \geq m \cdot ||\Delta x||$$

Тогда при $M \neq 0$:

$$\frac{||\Delta x||}{||x||} \leq \text{cond}(A) \cdot \frac{||\Delta b||}{||b||}$$

Свойства числа обусловленности:

1. $\text{cond}(A) \geq 1, \text{cond}(I) = 1$

   Если P — матрица перестановок, то $\text{cond}(P) = 1$.

2. $\text{cond}(c \cdot A) = \text{cond}(A)$
3. D — диагональная матрица, тогда $\text{cond}(D) = \frac{\max |d_{ii}|}{\min |d_{ii}|}$

Пример. $D = \text{diag}(0.1), n = 100$

$\det D = 10^{-100}$ — малое число.

При этом $\text{cond}(A) = \frac{0.1}{0.1} = 1$.

Таким образом, если рассмотреть определитель как меру вырожденности, то матрица очень близка к вырожденной, а если рассмотреть число обусловленности, то это не так.

Лекция 12

21 апреля

Пример. Опущено.

10.2.2 Нормы и анализ ошибок

$$||A|| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

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

Можем выразить другим образом:

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

$$||A|| = \max_{j}||a_j||$$

Лемма 1 (результат Уилкинсона)**.** Вычисленное решение x^* удовлетворяет системе $(A+E)x^* = b$, где элементы E имеют уровень ошибок округления.

$$\begin{aligned}(A+E)x^* &= b\\ b - Ax^* &= Ex^*\\ ||b-Ax^*|| &= ||Ex^*|| \le ||E|| \cdot ||x^*||\\ \frac{||b-Ax^*||}{||A|| \cdot ||x^*||} &\le C \cdot \varepsilon_{\text{машины}}\end{aligned}$$

Если A не вырождена, то:

$$x - x^* = A^{-1}(b - Ax)$$

$$||x - x^*|| \le ||A^{-1}|| \cdot ||E|| \cdot ||x^*||$$
$$\frac{||x - x^*||}{||x^*||} \le C \cdot ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \cdot \varepsilon_{\text{машины}}$$

Т.к. $||A^{-1}|| = \frac{1}{m}$, то:

$$\text{cond}(A) = ||A|| \cdot ||A^{-1}||$$

И таким образом:

$$\frac{||x - x^*||}{||x^*||} \le C \cdot \text{cond}(A) \cdot \varepsilon_{\text{машины}}$$

Можно заметить, что вычисление $\text{cond}(A)$ требует вычисление обратной матрицы. Это можно несколько упростить, заметив, что если a_j — столбцы A, $\tilde{a}_j$ — столбцы матрицы A^{-1}, то:

$$\text{cond}(A) = \max_j ||a_j|| \cdot \max_j ||\tilde{a}_j||$$

Тем не менее, такое вычисление примерно утраивает время вычисления. Но на практике точное значение $\text{cond}(A)$ не требуется и используются приблизительные оценки.

10.2.3 Оценивание числа обусловленности

$$||A^{-1}|| = \frac{1}{\min_x \frac{||Ax||}{||x||}} = \max_x \frac{||x||}{||Ax||} = \max_y \frac{||A^{-1}y||}{||y||}$$

Решим систему $Az = y$, тогда

$$\frac{||z||}{||y||} = \underbrace{\frac{||A^{-1}y||}{||y||}}_{\text{оценка} ||A^{-1}||}$$

Но если брать произвольный y, то оценка может быть неточной. Будем использовать такой y, что $A^{\mathsf{T}}y = C$, где C — вектор с компонентами ± 1.

Пример. Опущено.

11 Дополнительно о градиентных методах

Релаксационная последовательность задается рекурентно как $x^k = x^{k-1} + \alpha_k u^k, k \in N, u^k \in E_n$. Условие спуска при этом $\langle \nabla f(x), u \rangle < 0$.

Какое брать α_k? Такое, чтобы выполнялось следующее:

$$f(x^{k-1}) + \alpha_k u^k \le (1 - \lambda_k) f(x^{k-1}) + \lambda_k \min_{\alpha \in E} f(x^{k-1} + \alpha u^k) \tag{12}$$

Очевидно, что $\lambda_k \in [0, 1]$. Чтобы оценить это соотношение, используются эвристические приёмы. В частности, если

$$f(x^{k-1} + \alpha_k u^k) \leq f(x^{k-1})$$

, то $\{x_k\}$ будет релаксационной. Несложно заметить, что мы рассмотрели (12) для случая $\lambda_k = 0$.

Если $\lambda_k = 1$, то для нахождения наилучшего значения α_k^* необходимо решить задачу одномерной минимизации, что мы делали в лабораторной работе.

Если $\lambda_k \in (0, 1)$, то:

$$f(x^{k-1}) - f(x^k) \geq \lambda_k (f(x^{k-1}) - f(x^{k-1} + \alpha_k^* u^k))$$

Это равносильно (12) и из этого можно предположить, что λ_k характеризует наименьшую долю из максимально возможного уменьшения $f(x)$ вдоль направления u^k, которое должна обеспечивать релаксационная последовательность $\{x_k\}$.

Будем обозначать антиградиент как $\omega(x) = -\nabla f(x)$

11.1 Метод градиентного спуска

$$x^k = x^{k-1} + \beta_k \underbrace{\frac{\omega^k}{|\omega^k|}}_{u_k}$$

$$\beta_k = \underbrace{\alpha}_{\text{const}} |\omega^k|$$

Тогда можно переписать:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k \omega^k$$

Один из главных недостатков градиентного спуска состоит в том, что в окрестности стационарной точки $\tilde{x}$ шаг может оказаться слишком большим, и тогда метод “проскочит” $\tilde{x}$. Шаг также может быть настолько большим, что произойдёт $f(x^k) > f(x^{k-1})$ и последовательность перестанет быть релаксационной. Можно уменьшить шаг, но тогда замедлится сходимость релаксационной последовательности. Все эти проблемы сводятся к задаче оценки возможной величины α, которая обеспечивала бы высокую скорость сходимости без проскакивания стационарной точки.

Теорема 7. Пусть $f(x)$ ограничена снизу и дифференцируема в пространстве E_n, а её градиент удовлетворяет условию Липшица, т.е.:

$$\forall x, y \in E_n \ \ |\nabla f(x) - \nabla f(y)| \leq L|x - y|$$

, где $L > 0$ — const.

Тогда $\{x_k\} : x^k = x^{k-1} + \alpha\omega^k$ с $\alpha \in (0, \frac{2}{L})$ является релаксационной. При этом справедлива оценка:

$$f(x^k) \leq f(x^{k-1}) - \alpha\left(1 - \frac{\alpha L}{2}\right)|\nabla f(x^{k-1})|^2$$

и $|\nabla f(x^k)| \to 0$ при $k \to +\infty$.

Мы уже рассматривали схожую теорему для квадратичных функций. В том случае $L = \max \lambda_i$, где $\{\lambda_i\}$ — собственные значения. Эти теоремы согласованы.

Если $f(x)$ удовлетворяет теореме 7, то при $\lambda = \frac{1}{L}$ $\{x_k\}$ — релаксационная последовательность и не происходит "проскакивание" стационарной точки.

$$||\omega^k|| = ||\nabla f(x^{k-1})|| \leq L \cdot |x^{k-1} - \tilde{x}|$$

Следовательно, при $\alpha \leq \frac{1}{L}$:

$$|x^k - x^{k-1}| = \alpha|\omega^k| \leq |x^{k-1} - \tilde{x}|$$

Пусть $f(x)$ ограничена снизу, а $\{x^k\}$ такое, что $\exists\gamma_0 > 0$:

$$\begin{aligned} f(x^{k-1}) - f(x^k) &\geq \gamma_0|\omega^k|^2 \\ f(x^0) - f(x^m) &\geq \gamma_0 \sum_{k=1}^{m} |\nabla f(x^{k-1})|^2 \end{aligned} \tag{13}$$

$$\sum_{k=1}^{+\infty} |\nabla f(x^{k-1})|^2 \text{ — знакоположительный сходящийся ряд}$$

$\nabla f(x^k) \to 0$ при $k \to +\infty$. Таким образом, при построении $\{x_k\}$ если удастся выполнить условие (13), то последовательность градиентов $\to 0$, а следовательно $\{x_k\}$ будет сходиться к стационарной точке.

Найти значение константы L в реальных функция бывает трудно, если не невозможно. Тогда градиентный метод не даст гарантий, что он сойдётся. В таком случае модифицируем рекурентное соотношение:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k\omega^k$$

, т.е. α меняется на каждом шаге. Есть разные методы выбора α, например:

$$\varphi_k(\alpha) := f(x^{k-1} + \alpha\omega^k)$$

$$\varphi_k'(0) = \left\langle \nabla f(x), \omega^k \right\rangle = -|\omega^k|^2$$

В окрестности $\alpha = 0$ φ'_k убывает до α^*_k.

Если рассматривать $\alpha_k = \alpha^*_k$, то такой метод называется **исчерпывающий спуск**. При этом если $f(x)$ удовлетворяет теореме 7, то $\{x_k\}$ по исчерпывающему спуску удовлетворяет условиям (13).

$$\varphi'_k(\alpha) = \left\langle \nabla f(x^{k-1} + \alpha\omega^k), \omega^k \right\rangle$$
$$\left\langle \omega^{k+1}, \omega^k \right\rangle = \left\langle -\nabla f(x^k), \omega^k \right\rangle = -\varphi'_k(\alpha^*_k) = 0$$

$$\begin{aligned} ||\omega^k||^2 &= \left\langle \omega^k, \omega^k - \omega^{k+1} \right\rangle \\ &\le |\omega^k| \cdot |\omega^k - \omega^{k+1}| \\ &= |\omega^k| \cdot |\nabla f(x^{k-1}) - \nabla f(x^k)| \\ &\le L \cdot |\omega^k| \cdot |x^{k-1} - x^k| \\ &= L \cdot \alpha^*_k \cdot |\omega^k|^2 \end{aligned}$$

Таким образом:

$$\alpha^*_k \ge \frac{1}{L}$$
$$f(x^{k-1}) - f(x^k) \ge f(x^{k-1}) - f(\tilde{x}^k) \ge \frac{1}{2L}|\omega^k|^2$$
$$\tilde{x}^k = x^{k-1} + \underbrace{\frac{1}{L}}_{\alpha}\omega^k$$

Лекция 13

28 апреля

12 Минимизация квадратичной функции

Квадратичные функции имеют вид:

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle + \langle b, x\rangle + C$$

, где A — симметричная матрица, также являющейся матрицей Гессе $\mathbf{H}$ для $f(x)$. При этом $\nabla f(x) = Ax + b$.

Если матрица A невырождена, то в силу необходимого условия экстремума $f(x)$ имеет единственную стационарную точку $x^* = -A^{-1}b$, что получается при $\nabla f(x) = 0$

С другой стороны, x^* является точкой наименьшего значения $f(x)$ тогда и только тогда, когда квадратичная функция $\langle Ax, x\rangle$ положительно определена.

Не умаляя общности[1] допустим, что $x^* = \vec{0}$, т.е. $b = 0$. Тогда

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle, \quad x \in E_n \tag{14}$$

Т.к. мы рассматриваем положительно определенную A, то квадратичная функция $\frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$ неотрицательна в E_n и достигает наименьшего значения 0 в единственной точке $x^* = 0$.

12.1 Метод градиентного спуска

Для $f(x)$ из (14) $\nabla f(x) = Ax$ в точке x. Пусть начальное приближение $x^0 \neq 0$, тогда антиградиент $w^1 = -\nabla f(x^0) = -Ax^0$, и в общем виде:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k w^k, \quad k \in N$$

[1] Сдвинув систему координат, если это требуется.

$$x^1 = x^0 + \alpha_1 w^1 = x^0 - \alpha_1 A x^0 = (I^2 - \alpha_1 A) x_0 \tag{15}$$

Из (15) следует, что точку минимума квадратичной функции можно достичь за одну итерацию, если x^0 — собственный вектор матрицы A. Кроме того, т.к. $Ax^0 = \lambda_j x^0$, где x_0 — собственный вектор A, а λ_j — соответствующее собственное значение, $(A - \lambda_j I)x^0 = 0$. Тогда если $\alpha_1 = \frac{1}{\lambda_j}$, то:

$$x^1 = \left(I - \frac{1}{\lambda_j} A\right) x^0 = -\frac{1}{\lambda_j}(A - \lambda_j I)x^0 = 0$$

, т.е. $x^1 = x^* = 0$

Геометрическая интерпретация: в двумерном случае $f(x)$ есть эллиптический параболоид с центром в начале координат. Метод градиентного спуска приведет в точку $(0, 0)$ за одну итерацию, если начальная точка выбрана на одной из осей эллипсов, т.е. радиус-вектор точки является собственным вектором A.

В частности, если $A = \lambda I$, то каждый ненулевой вектор является собственным. Таким образом, для такой матрицы минимум достигается за одну итерацию при любом выборе x^0.

Квадратичную форму вида (14) можно привести к так называемому каноническому виду, т.е. к виду с единичной матрицей. Рассмотрим, как это сделать.

Применим ортогональное преобразование к форме f и получим f_1, тогда:

$$f_1(\xi) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \xi_j^2$$

, где $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 & \dots & \xi_n \end{pmatrix}$, λ_j — положительные собственные значения A, n — количество оных.

Изменим масштаб переменных заменой

$$\eta_j = \sqrt{\lambda_j}\xi_j$$

, тогда

$$f_2(\eta) = \sum_{j=1}^{n} \eta_j^2$$

После этих замен минимизация функции выполняется за одну итерацию при любом выборе x^0 по выкладкам выше.

[2] Единичная матрица

Казалось бы, этот подход очень помогает в минимизации функций. Однако для данных преобразований требуется решить сложную задачу вычисления собственных значений матрицы. В силу этого обычно используются более совершенные методы. Однако этот метод быстро сходится даже для функций овражного характера.

12.2 Метод градиентного спуска с константным шагом

Пусть $\alpha_k = \alpha = \text{const}$ на всех итерациях.

На k-той итерации:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha w^k = (I - \alpha A)x^{k-1} \tag{16}$$

Оценивать сходимость релаксационной последовательности $\{x^k\}$ можно с помощью **теоремы о неподвижной точке**. Согласно данной теореме $\{x^k\}$ сходится к неподвижной точке x^* отображения $f(x)$, если данное отображение является **сжимающим**, то есть для него выполняется условие Липшица:

$$|f(x) - f(y)| \leq q|x - y|$$

, где $q = \text{const} < 1$

В (16) $I - \alpha A$ есть сжимающее отображение, если норма этого отображения < 1. Для симметричных матриц норма равна спектральной норме, которая в свою очередь равна $\max_i |\lambda_i|$, где λ_i — собственные числа данной матрицы.

Таким образом, для сходимости релаксационной последовательности достаточно выполнения

$$q(\alpha) = ||I - \alpha A|| < 1$$

Упорядочим собственные значения матрицы A как:

$$0 < \lambda_1 < \cdots < \lambda_n$$

Матрица $I - \alpha A$ имеет собственные значения вида $1 - \alpha\lambda_j$, а следовательно:

$$1 - \alpha\lambda_n < 1 - \alpha\lambda_{n-1} < \cdots < 1 - \alpha\lambda_1 < 1$$

и условие $||I - \alpha A|| < 1$ равносильно условию:

$$\begin{cases} 1 - \alpha\lambda_n > -1 \\ 1 - \alpha\lambda_n < 1 \end{cases} \Rightarrow \alpha \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$$

Кроме того, из теоремы о неподвижной точки следует, что для $\{x^k\}$ выполнено $|x^k - x^*| \leq q^k|x^0 - x^*|$. Тогда для ускорения сходимости релаксационной последовательности q должно быть как можно меньше.

$q(\alpha)$ минимально, если $1-\alpha\lambda_n$ и $1-\alpha\lambda_1$ совпадают по абсолютны по знаку:

$$-(1-\alpha\lambda_1) = 1-\alpha\lambda_n$$

$$\alpha^* = \frac{2}{\lambda_1+\lambda_n} \leq \frac{2}{\lambda_n}$$

При $\alpha = \alpha^*$:

$$q^* = q(\alpha^*) = \frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1} = \frac{\text{cond}A-1}{\text{cond}A+1}$$

Если $\text{cond}A \gg 1$, функция имеет овражную стуктуру и метод сходится медленно.

Если $A = I$, то все собственные значения 1, $\text{cond}A = 1$ и $q^* = 0$, а следовательно минимум достигается за одну итерацию $\forall x^0$.

Если $\alpha \notin \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$, $\{x^k\}$ не релаксационная, а метод расходится или зацикливается.

12.3 Минимизация с использованием исчерпывающего спуска

Этот метод нарушает условие $\alpha \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$.

Исчерпывающий спуск на k-той итерации ищет стационарную точку $\varphi_k(\alpha) = f(x^{k-1} + \alpha w^k)$.

$$\varphi_k(\alpha) = \frac{1}{2}\left\langle A(x^{k-1}+\alpha w^k), x^{k-1}+\alpha w^k\right\rangle = f(x^{k-1}) + \alpha\left\langle Ax^{k-1}, w^k\right\rangle + \frac{\alpha^2}{2}\left\langle Aw^k, w^k\right\rangle$$

Эта функция имеет положительный коэффициент при старшей степени, следовательно она имеет единственную стационарную точку

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle Ax^{k-1}, w^k\right\rangle}{\left\langle Aw^k, w^k\right\rangle} = \frac{|w^k|^2}{\left\langle Aw^k, w^k\right\rangle} \tag{17}$$

Из (17):

- $\alpha_k = \frac{1}{\lambda_n}$, если x^{k-1} — собственный вектор A с собственным значением λ_n
- $\alpha_k = \frac{1}{\lambda_1}$, если x^{k-1} — собственный вектор A с собственным значением λ_1

Если $\text{cond}A = \frac{\lambda_n}{\lambda_1} > 2$, то $\alpha_k \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$ нарушается при $\alpha_k = \frac{1}{\lambda_1}$.

Для квадратичной функции метод наискорейшего спуска эквивалентен градиентному методу с исчерпывающим спуском, т.к. квадратичная функция является строго выпуклой.

12.4 Метод сопряженных направлений

Правило перехода:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k, \quad k \in N$$

, где α_k — шаг, p^k — вектор спуска.

Если A — симметричная положительная определенная матрица, то $\langle x, y \rangle_A = \langle Ax, y \rangle$ — скалярное произведение в E_n. Тогда задача приведения квадратичной формы к каноническому виду сводится к выбору ортонормированного базиса в евклидовом пространстве со скалярным произведением $\langle x, y \rangle_A$

Плюсы подхода:

- Позволяет упростить вид квадратичной функции.
- Не требует нахождения собственных значений, позволяет использовать ортогонализацию.

Определение. Если $p^1 \neq 0, p^2 \neq 0, \langle Ap^1, p^2 \rangle = 0$, то такие вектора называются **сопряженными** относительно положительно определенной матрицы A или A**-ортогональными**. Направления, определенные p^1 и p^2, также называются сопряженными.

Рассмотрим A-ортогональный базис p^j. В этом базисе f имеет канонический вид:

$$f_1(\xi) = \lambda_1 \xi_1^2 + \cdots + \lambda_n \xi_n^2$$

, где $\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 & \dots & \xi_n \end{pmatrix}, \lambda_j = \frac{1}{2}||p^j||_A^2$

Функция $f_1(\xi)$ — сепарабельна[3], а следовательно:

- Исчерпывающий спуск в направлении p^j минимизирует одно из слагаемых такой функции.
- Последовательность из n исчерпывающих спусков в направлениях $p^1 \dots p^n$ минимизирует все слагаемые, следовательно минимизирует искомую функцию.

Рассмотрим первый спуск.

$$x^1 = x^0 - \xi_1^1 p^1$$

, где ξ_1^0 — первая координата x^0 в ортогональном базисе p^j:

$$\xi_1^0 = \frac{\langle Ax^0, p^1 \rangle}{\langle Ap^1, p^1 \rangle}$$

Можем заметить, что рассмотренная формула и (16) отличаются только в знаке.

[3] Представима в виде $\sum_{i=1}^n f_i(\xi_i)$

Теорема 8. Точка минимума квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$ с положительно определенной матрицей A достигается не более чем за n итераций спуска, если направления спуска задаются векторами $p^k \in E_n$, сопряженными относительно матрицы A, а параметры α_k, определяющие шаг спуска в (16), вычисляются по формуле исчерпывающего спуска

$$\alpha_k = -\frac{\left\langle Ax^{k-1}, p^k\right\rangle}{\langle Ap^k, p^k\rangle}$$

Примечание. Если p^j и $-p^j$ в точке x^{j-1} не определяют направление спуска, то $\langle Ax^{j-1}, p^j\rangle = 0$, следовательно $\alpha_j = 0$ и спуск в направлении p^j не производится, число итераций $< n$.

Координаты x^0 в A-ортогональном базисе можно выразить через скалярное произведение

$$x^0 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\langle Ax^0, p^i\rangle}{\langle Ap^i, p^i\rangle} p^i \tag{18}$$

Если x^* — точка минимума квадратичной формы с положительно определенной матрицей A, то:

$$x^0 - x^* = \sum_{i=1}^{n} \frac{\langle A(x^0 - x^*), p^i\rangle}{\langle Ap^i, p^i\rangle} p^i = \sum_{i=1}^{n} \frac{\nabla f(x^0), p^i}{\langle Ap^i, p^i\rangle} p^i$$

$$x^* = x^0 - \sum_{i=1}^{n} \frac{\nabla f(x^0), p^i}{\langle Ap^i, p^i\rangle} p^i \tag{19}$$

$$\left\langle Ax^0, p^i\right\rangle p^i = p^i \left\langle p^i, Ax^0\right\rangle = p^i (p^i)^\mathsf{T} Ax^0$$

И тогда (18) можно записать как:

$$x^0 = \sum_{i=1}^{n} \frac{p^i (p^i)^\mathsf{T}}{\langle Ap^i, p^i\rangle} Ax^0$$

Т.к. это верно $\forall x^0$, то рассматриваемый оператор тождественный:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{p^i (p^i)^\mathsf{T}}{\langle Ap^i, p^i\rangle} A = \mathbf{1}$$

Следовательно:

$$A^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{p^i (p^i)^\mathsf{T}}{\langle Ap^i, p^i\rangle}$$

Таким образом, по p^i можно построить A^{-1} и (19) можно переписать как:

$$x^* = x^0 - \sum_{i=1}^{n} \frac{\nabla f(x^0), p^i}{\langle Ap^i, p^i\rangle} p^i$$

$$= x^0 - \sum_{i=1}^{n} \frac{p^i (p^i)^\mathsf{T}}{\langle Ap^i, p^i \rangle} \nabla f(x^0)$$
$$= x^0 - A^{-1} \nabla f(x^0)$$

В итоге, выполнение всех n итераций исчерпывающего спуска есть один спуск вида

$$x^* = x^0 - A^{-1} \nabla f(x^0)$$

Основа метода сопряженных направлений — использование векторов p^j.

Различие в способах построения сопряженных векторов порождает несколько вариантов метода сопряженных направлений.

Теперь рассмотрим минимизацию функции

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

Мы можем ортогонализовать любой базис, но более эффективно исходить из системы антиградиентов, ортогонализуя базис в процессе спуска.

Выберем приближение $x^0 \in E_n$. Первая итерация:

$$w^1 = -\nabla f(x^0) = -Ax^0 - b$$

$$p^1 := w^1$$

Если $|p^1| \neq 0$, то p^1 — направление спуска, иначе $x^0 = x^*$ и процесс окончен.

Производим исчерпывающий спуск в направлении p^1 по формуле (17):

$$\alpha_1 = \frac{|w^1|^2}{\langle Aw^1, w^1 \rangle} = \frac{|p^1|^2}{\langle Ap^1, p^1 \rangle}$$

$$x^1 = x^0 + \alpha_1 p^1$$

Вторая итерация:

$$w^2 = -Ax^1 - b$$

Если $|w^2| = 0$, то$x^0 = x^*$ и процесс окончен, иначе проведем ортогонализацию p^1 и w^2 относительно скалярного произведения $\langle x, y \rangle_A$:

$$p^2 = w^2 - \frac{\langle Ap^1, w^2 \rangle}{\langle Ap^1, p^1 \rangle} p^1$$

p^2 — направление спуска из x^1:

$$\left\langle \nabla f(x^1), p^2 \right\rangle = -\left\langle w^2, \beta_1 p^1 + w^2 \right\rangle = -\left\langle w^2, w^2 \right\rangle = -|w^2|^2 < 0$$

, где $\beta_1 = -\frac{\left\langle Ap^1, w^2 \right\rangle}{\left\langle Ap^1, p^1 \right\rangle}$

Дальнейшие итерации аналогичны.

Уточнения:

1. Каждый w^k ортогонален не только предпоследнему направлению спуска p^{k-1}, но и всем $p^i, i < k-1$

   Доказательство опущено.

2. Антиградиент w^k сопряжен с $\forall p^i$:

   $$\alpha_i \left\langle Ap^i, w^k \right\rangle = \left\langle w^i - w^{i+1}, w^k \right\rangle = \left\langle w^i, w^k \right\rangle - \left\langle w^{i+1}, w^k \right\rangle = 0$$

Из этих уточнений следует, что процесс ортогонализации можно записать в виде:

$$p^k = w^k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\left\langle Ap^i, w^k \right\rangle}{\left\langle Ap^i, p^i \right\rangle} p^i$$

Следовательно:

$$p^k = w^k - \frac{\left\langle Ap^{k-1}, w^k \right\rangle}{\left\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \right\rangle} p^{k-1}$$

Это главный выигрыш в использовании системы антиградиентов.

Общая схема метода:

- $k = 1$:

  Выбираем $x^0, w^1 = -Ax^0 - b, p^1 = w^1, \alpha_1 = \frac{|p^1|^2}{\left\langle Ap^1, p^1 \right\rangle}, x^1 = x^0 + \alpha_1 p^1$

- $k > 1$:

$$\begin{cases} w^k = -Ax^{k-1} - b \\ p^k = w^k - \frac{\left\langle Ap^{k-1}, w^k \right\rangle}{\left\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \right\rangle} p^{k-1} \\ x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \end{cases}$$

α_k определяется из условия исчерпывающего спуска, например:

$$\alpha_k = \frac{\left\langle w^k, p^k \right\rangle}{\left\langle Ap^k, p^k \right\rangle}$$

Метод сопряженных направлений также можно использовать для неквадратичных функций, если заменить A на матрицу Гессе.

Не дописано