Корзун В.

<u>Сходимость квазиньютоновских матриц порожденных методом SR1.</u>

**Данная статья является переводом оригинальной статьи «Convergence of quasi-Newton matrices generated by the symmetric rank one update», A.R. Conn* IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY 10598, USA N.I.M. Gould Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, UK Ph.L. Toint Department of Mathematics, Faeultds Universitaires ND de la Paix, B-5000, Namur, Belgium*

**Некоторые названия могут отличаться от принятых, а в некоторых местах перевод может быть неверен, хоть я и старался перевести как надо.*

**На данный момент вырезан кусок перед третьим разделом и доказана всего лишь одна лемма.*

**Оригинал можно найти по ссылке* ftp://ftp.numerical.rl.ac.uk/pub/nimg/pubs_old/ConnGoulToin91_mp.pdf

**Перевод сделал Корзун Владислав, МФТИ ФИВТ 397*

Квазиньютоновские алгоритмы безусловной нелинейной минимизации генерируют последовательность матриц, которую можно рассматривать как приближения целевой функции вторых производных. Эта статья дает условия, при которых эти приближения могут быть доказаны для глобально сходящихся к настоящим матрицам Гессе (квадратная матрица, состоящая из вторых частных производных скалярной функции или скалярного поля), в случае использования формулы SR1. Также рассмотрено и доказано, что скорость сходимости улучшается со скоростью сходимости базовых итераций. Теория подтверждается некоторыми численными экспериментами, которые также показывают, что сходимость приближений Гессе существенно медленнее других известных квазиньютоновских формул.

1. <u>Введение</u>

Квазиньютоновские методы признаются сегодня одними из самых эффективных способов решать нелинейные несвязные или связные ограниченные задачи оптимизации. Эти методы в основном используются, когда вторая производная матрицы целевой функции либо отсутствует, либо слишком сложна для вычисления. Эти методы похожи на ньютоновские, но избегают необходимость вычисления матриц Гессе рекурсивно, от итерации к итерации, в симметричную матрицу, которую можно рассматривать как приближение Гессиана. Следовательно, они позволяют эксплуатировать кривизну задачи в численном алгоритме, несмотря на то, что требуются только первые производные (градиенты) и значения функции.

Рассматриваемая задача заключается в нахождении локального решения $x^{'}$ в R^n

$$min\, f(x), \tag{1}$$

где $f(x)$ — гладкая функция из R^n в R, использующая квазиньютоновский метод. Обозначим последовательность итераций { x_k }, генерируемым рассматриваемым методом. Важно отметить, что большая часть теории и практики этой области основывается на “линейном поиске”, модель итераций алгоритма которого имеет вид

$$x_{(k+1)}=x_k-a_k B_k^{-1}\nabla f(x), \tag{2}$$

где B_k - симметричное приближение Гессиана, которое удовлетворяет “уравнению секущей”

$$B_{(k+1)}(X_{(k+1)}-X_k)=\nabla f(X_{(k+1)})-\nabla f(x_k), \tag{3}$$

и где a_k - подходящий параметр релаксации, который вычисляется путем решения (иногда довольно неточно) одномерной задачи

$$\min_{a>0} f(x_k-a d_k), \tag{4}$$

где искомое направление d_k получается из

$$d_k=-B_k^{-1}\nabla f(x_k). \tag{5}$$

Эта последняя процедура часто называют ”линейным поиском” , отсюда и название алгоритмической модели. В этом контексте, сохраняя определенность B_k положительным имеет отличительное преимущество, которое гарантирует, что направление спуска d_k будет сонаправленно с $f(x)$. Эта положительная определенность матриц B_k может быть обеспечена путем введения подходящих условий на значение a_k и используя адекватные соотношения для обновления B_k. В этом контексте, обновление матриц B_k с помощью формулы Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шэнно принимает вид

$$B_{(k+1)} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}, \tag{6}$$

где

$$s_k := x_{(k+1)} - x_k \tag{7}$$

и

$$y_k := \nabla f(x_{(k+1)}) - \nabla f(x_k), \tag{8}$$

Эта формула единогласно рекомендовалась в течение последних 15 лет. Поддержание положительной определенности приближений к матрице Гессе было, однако, были и некоторые важные недостатки. Первый заключался в том, что даже если истинный Гессиан обычно положительно определенный является решением задачи, может быть случай, когда текущая итерация алгоритма далеко и концепция приближения Гессиана на этих итерациях должна быть пересмотрена. Также отметим, что если решение задачи минимизации должно лежать в пределах области, определенной ограничениями на переменные, или на область наложены более общие ограничения, то Гессиан может быть неопределенным, даже в точке, являющейся решением. Наконец, положительная определенность несовместима на практике с симметрией, уравнением секущей (3) и разреженности B_k. Все эти наблюдения оправданы, по мнению авторов, продолжением исследований неопределенных квазиньютоновских методов, особенно в контексте крупномасштабных задач, для которых сохранение структуры и разряженность в B_k имеют первостепенное значение.

С другой стороны, развитие «доверительного региона» методов, в последнее время, позволило создать эффективные алгоритмы, которые способны обрабатывать неопределенные приближения Гессиана. В основном используя в сочетании с точной информацией о Гессиане (то есть в пределах метода Ньютона), эти алгоритмы стали важным предметом исследования в более общем контексте. Их успех вероятно связан с их замечательной численной надежностью и их комплексным теоретическим обоснованием. Среди основных отличий между доверительным регионом и методом линейного поиска тот факт, что шаг s_k больше не кратен направлению d_k, и что линейный поиск не выполняется.

В двух последних работах, авторы описывают и анализируют класс методов доверительного региона для неограниченной и связной условной минимизаций. Вторая из этих работ, в частности, дает численное сравнение нескольких квазиньютоновских формул обновления, используемых в доверительном регионе и применяемых на задачах небольших размерностей. Формула (6) рассматривается вместе с формулой Давидона-Флетчера-Пауэлла

$$B_{(k+1)} = B_k + \frac{r_k y_k^T + y_k r_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{(r_k^T s_k) y_k y_k^T}{(y_k^T s_k)^2}, \tag{9}$$

Симметричная формула ранга 1 (SR1)

$$B_{(k+1)} = B_k + \frac{r_k r_k^T}{r_k^T s_k} \qquad (10)$$

Формула Пауэлла-симметрично-Бройдена (PSB)

$$B_{(k+1)} = B_k + \frac{r_k s_k^T + s_k r_k^T}{s_k^T s_k} - \frac{(r_k^T s_k) s_k s_k^T}{(s_k^T s_k)^2}, \qquad (11)$$

где определим остаток r_k как

$$r_k := y_k - B_k s_k. \qquad (12)$$

Несколько удивительно как традиционное превосходство обновления Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шэнно ставится под сомнение этими численными экспериментами, и формула SR1 кажется, значительно более эффективной в рамках доверительной области, чем другие квазиньютоновские методы, протестированные в данном контексте. Было предложено, что это интересное отношение может быть связано с тем, что лучшая сходимость матриц B_k к истинному Гессиану цели решения наблюдается при использовании обновления SR1, по сравнению с другими формулами обновлений. Цель данной статьи прояснить это предложение, рассматривая сходимость матриц B_k к истинному Гессиану в предельной точке последовательности итераций, произведенных с помощью алгоритма минимизации, при условии, что направления поиска s_k остаются равномерно линейно независимы, это будет определено в следующем разделе. Скорость сходимости матриц также проверена, и оказалось, что сильно связана со скоростью сходимости последовательности { x_k }. Следующий раздел содержит краткий обзор того, что известно о сходимости квазиньютоновских матриц, а также обсуждаются сделанные предположения. Раздел 3 посвящен доказательству сходимости обновления SR1, а в разделе 4 представлены некоторые численные результаты, подтверждающие эту теорию, вместе с остальными формулами, рассмотренных выше.

2. Сходимость приближений Гессиана в квазиньютоновских методах.

Мы рассматриваем решение задачи безусловной оптимизации

$$\min_{x \in R^n} f(x), \qquad (13)$$

поиска локального минимума, используя следующую алгоритмическую модель.

Алгоритм 1. Пусть x_0 - начальная точка, а также начальное состояние симметрической матрицы n на n B_0 .

Шаг 1. Обозначим k = 0 и вычислим $g_0 := \nabla f(x_0)$.

Шаг 2. найдем вектор s_k .

Шаг 3. Обозначим $x_{(k+1)} = x_k + s_k$, (14)

вычислим $g_{(k+1)} = \nabla f(x_{(k+1)})$ и

$$y_k = g_{(k+1)} - g_k \qquad (15)$$

Шаг 4. Обновим матрицу B_k и получим $B_{(k+1)}$, использую одну из квазиньютоновских формул, описанных выше.

Шаг 5. Увеличим k на единицу и перейдем к шагу 2.

Это все в общих чертах и , естественно, требует некоторых пояснений.

1. Мы не указали, каким образом должен быть вычислен s_k . Заметим, однако, что мы задали вычисление в классическом линейном поиске

$$s_k = -a_k B_k^{-1} g_k \tag{16}$$

из (2), где мы предположили, что B_k невырожденная.

Эта свобода выбора s_k ,тем не менее, весьма полезна. В частности, мы имеем в виду определение шага по схеме доверительного региона (например, используя технику сопряженных градиентов), который не даст (16). Другой случай, когда (16) не будет проводить это в важном контексте больших скалярных оптимизаций с использованием частично разделяемых функций и распределенных обновлений, где шаг вычисляется путем принятия всех элементов функции во внимание и, следовательно имеет лишь косвенное отношение к какому-либо конкретному элементу приближения Гессиана.

2. Не были даны критерии остановки. Мы, действительно, заинтересованы в асимптотике алгоритма, и будем считать, что он производит бесконечную последовательность итераций { x_k } и бесконечную последовательность квазиньютоновских матриц { B_k }.
3. В случае, когда формула SR1 (10) используется для обновления B_k , мы должны убедиться, что они хорошо определены. Таким образом, формула (10) может быть использована только если

$$|r_k^T s_k| \geq c_1 \|r_k\| \|s_k\|, \tag{17}$$

где $c_1 \in (0,1)$ - константа. (Здесь и ниже, норма есть обычная $l_2 - норма$ на векторах соответствующая индуцированная норма матриц). Если условие нарушается, то зададим $B_{(k+1)} = B_k$.
4. Предполагается, что для всех итераций используется одна и та же квазиньютоновская формула: например, мы не используем формулу Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шэнно для одних итераций и формулу Давидона-Флетчера-Пауэлла для других.

Теперь мы представим наши предположения о проблеме и последовательности итераций, полученных нашей алгоритмической моделью.

(Пр.1) $f(x)$ - дважды всюду непрерывно дифференцируемая функция.
(Пр.2) $\nabla^2 f(x) := H(x)$ - постоянная Липшица, то есть существует константа $c_2 > 0,$ такая что для всех $x, y \in R^n$,

$$\|H(x) - H(y)\| \leq c_2 \|x - y\| \tag{18}$$

(Пр.3) Последовательность { x_k } сходится к некоторой конечной точке x'
(Пр.4) Последовательность { s_k } равномерно линейно независимы, то есть существуют $c_3 > 0, k_0 и\ m \geq n,$ такие что для любых $k \geq k_0$, можно выбрать n различных индексов

$$k \le k_1 < \ldots < k_n \le k+m$$

с

$$\sigma_{min}(S_k) \ge c_3, \tag{19}$$

где $\sigma_{min}(S_k)$ - минимальное сингулярное значение матрицы

$$S_k := \left(\frac{S_{(k_1)}}{\|S_{(k_1)}\|}, \ldots, \frac{S_{(k_n)}}{\|S_{(k_n)}\|}\right). \tag{20}$$

3. Симметричное обновление первого ранга для неквадратичных функций

Теперь обратим наше внимание снова на формулу SR1, но на общую неквадратичную целевую функцию, которая удовлетворяет (Пр.1) и (Пр.2). Сначала докажем следующую важную лемму, удивительно простой вариант квадратичного случая.

Лемма 1. Предположим, что (Пр.1) и (Пр.2) выполняются , а также что $\{ x_k \}$ - последовательность итераций, генерируемых с помощью алгоритма, описанного выше, используя формулу SR1(10). Кроме того, предположим, что (17) выполняется при каждой итерации. Тогда

$$\|y_j - B_{(j+1)} s_j\| = 0 \tag{24}$$

для всех j и

$$\|y_j - B_i s_j\| \le \frac{c_2}{c_1}\left(\frac{2}{c_1}+1\right)^{(i-j-2)} \eta_{ij} \|s_j\| \tag{25}$$

для любых $j\, и\, i \ge j+1, где$

$$\eta_{ij} := max[\|x_p - x_s\| : j \le s \le p \le i]. \tag{26}$$

Доказательство. Заметим сначала, что (24) и (25) с i = j + 1 немедленно следует из (3). Докажем (25) по индукции. Выберем $k \ge j+1$ и предположим что выполняется предположение индукции для всех $i = j+1, \ldots, k.$ Теперь заметим, что

$$|r_k^T s_j| = |y_k^T s_j - s_k^T B_k s_j| \le |y_k^T s_j - s_k^T y_j| + \frac{c_2}{c_1}\left(\frac{2}{c_1}+1\right)^{(k-j-2)} \eta_{ij} \|s_j\| \|s_k\|, \tag{27}$$

где мы используем (12), наше индуктивное предположение и неравенство Коши-Шварца. Теперь, используя теорему о среднем, получаем, что для всех l,

$$y_l = H_l s_l, \tag{28}$$

где

$$H_l = \int_0^1 H(x_l + ts_l)\, dt. \tag{29}$$

Отсюда (27) вытекает, что

$$|r_k^T s_j| \le |s_k^T (H_k - H_j) s_j| + \frac{c_2}{c_1} \left(\frac{2}{c_1} + 1 \right)^{(k-j-2)} \eta_{ij} \|s_j\| \|s_k\| \le . \tag{30}$$

$$c_2 \eta_{(k+1\,j)} \|s_j\| \|s_k\| + \frac{c_2}{c_1} \left(\frac{2}{c_1} + 1 \right)^{(k-j-2)} \eta_{ij} \|s_j\| \|s_k\| ,$$

где мы используем (29), (Пр.2) и определение (26). Но из (10), (17) и неравенства треугольника вытекает

$$\|y_j - B_{(j+1)} s_j\| = \|y_j - B_j s_j - \frac{r_k r_k^T s_j}{r_k^T s_k}\| \le \|y_j - B_j s_j\| + \frac{|r_k^T s_j|}{c_1 \|s_k\|} \tag{31}$$

и следовательно

$$\|y_j - B_{(j+1)} s_j\| \le \left(\frac{c_2}{c_1} \left(\frac{2}{c_1} + 1 \right)^{(k-j-2)} + \frac{c_2}{c_1^2} \left(\frac{2}{c_1} + 1 \right)^{(k-j-2)} \right) \eta_{kj} \|s_j\| + \frac{c_2}{c_1} \eta_{(k+1\,j)} \|s_j\| \tag{32}$$

используя (30), предположение индукции и (31). Последнее неравенство затем дает (25) для $i = k+1$, если принять во внимание тот факт, что $c_1 \in (0,1)$ и используя простое неравенство

$$\eta_{kj} \le \eta_{(k+1\,j)} \tag{33}$$

Лемма доказана.