

Описание подбора коэффициентов квазиньютоновским методом

Дискретная модель Лотки-Вольтерра

$$\begin{cases} x_1(t+1) = x_1(t) + \tau(\alpha_1 x_1 - \beta_1 x_1 x_2) \\ x_2(t+1) = x_2(t) + \tau(-\alpha_2 x_2 + \beta_2 x_1 x_2) \end{cases}$$

Критерий:

$$F(\beta) = \sum_{i=1}^n r_{1i} + \sum_{i=1}^n r_{2i} = \sum_{i=1}^n (y_{i1}(\beta) - x_{i1})^2 + \sum_{i=1}^n (y_{i2}(\beta) - x_{i2})^2 \rightarrow \min$$

y_{in} - данные, рассчитанные по модели ($n = 1, 2$ - популяция фитопланктона и зоопланктона); x_{in} - данные мониторинга

$\beta_0 = (\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2)$ - начальное приближение

Итерационная формула для поиска β

$$\beta = \beta^0 + \frac{-2J_1^T r_1 - 2J_2^T r_2}{2J_1^T J_1 + 2\sum_{j=1}^m r_{1j} H_{1j}^* + 2J_2^T J_2 + 2\sum_{j=1}^m r_{2j} H_{2j}^*}$$

Приближение матрицы Гессе: $H \approx B$

Алгоритм BFGS

Шаг 1. Определение начального значения матрицы B . Можно взять единичную матрицу

Шаг 2. Определение направления поиска $\Delta\beta$: $\Delta\beta = -B^{-1}\nabla F(\beta^0)$

Шаг 3. Определение рекуррентного соотношения: $\beta_{n+1} = \beta_n + \alpha \cdot \Delta\beta$. Коэффициент α находится через линейный поиск (постепенное увеличение аргумента функции, пока не будет найдено требуемое значение). Коэффициент α должен удовлетворять условиям Вольфе (см. ниже)

Условия Вольфе

Используются в задачах минимизации для вычисления достаточного шага решения

$\Delta\beta$ - направление поиска

α - длина шага

$$0 < c_1 < c_2 < 1$$

Условие 1:
$$F(\beta^0 + \alpha\Delta\beta) \leq F(\beta^0) + c_1\alpha\Delta\beta^T \nabla F(\beta^0)$$

Условие 2:
$$-\Delta\beta^T \nabla F(\beta^0 + \alpha\Delta\beta) \leq -c_2\Delta\beta^T \nabla F(\beta^0)$$

Шаг 4. Определение шага изменения параметра и градиента на итерации

$$s_k = \beta_{k+1} - \beta_k \quad y_k = \nabla F_{n+1} - \nabla F_n$$

Шаг 5. Обновление гессиана по формуле (формула Шеннона-Моррисона)

$$B_{n+1} = \left(I - k \cdot s_n \cdot y_n^T \right) B_n \left(I - k \cdot y_n \cdot s_n^T \right) + s_n s_n^T$$

Шаг 6. Алгоритм продолжается, пока не будет найдено решение с заданной точностью