

Лекции по Методам оптимизации 4 семестр

Пуга Yaroshevskiy

15 апреля 2021 г.

Оглавление

1	3
2 Лекции 1 и 2	4
2.1 Теория погрешности	4
2.1.1 Значащие цифры	5
2.1.2 Верные цифры	5
2.1.3 Распространение погрешности	5
2.2 Одномерная минимизация функций	7
2.2.1 Унимодальные функции	7
2.2.2 Прямые методы	8
3	9
3.1 Одномерный поиск	9
3.1.1 Метод золотого сечения	9
3.1.2 Метод Фибоначчи	10
3.1.3 Метод парабол	11
4	12
4.1 Одномерная оптимизация	12
4.1.1 Определение интервала неопределенности	12
4.2 Методы с использованием производной	13
4.2.1 Метод средней точки	13
4.2.2 Метод хорд(метод секущей)	13
4.2.3 Метод Ньютона(метод касательной)	14
5	16
5.1 Метод Ньютона(продолжение). Вывод через ряд Тейлора . . .	16
5.1.1 Аппроксимация производных	17
5.1.2 Метод Ньютона(продолжение)	17
5.1.3 Модификации метода Ньютона	18
5.1.4 TODO Метод минимизации многомодальных функций	18

6		19
6.1	Постановка задачи	19
6.1.1	Свойства квадратичных форм	20
6.1.2	Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций	20
6.1.3	Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума	22
7		23
7.1	Критерии Сильвестра	23
7.1.1	Достаточный условия	23
7.1.2	Необходимые условия	23
7.2	Собственные значения	23
7.3	Общие прицпины многомерной оптимизации	23
7.3.1	Выпуклые квадратичные функции	23
7.3.2	Принципы многомерной оптимизации	25
8		27
8.1	Метод градиентного спуска	28
8.2	Метод наискорейшего спуска	30
9		33
9.1	Метод сопряженных градиентов	33
9.2	Метод стохастического градиентного спуска	34
9.2.1	Adagrad (модификация)	35
9.3	Метод покоординатного спуска	35
10		36
10.1	Формы хранения матриц	36
10.1.1	Диагональный	37
10.1.2	Ленточный формат	37
10.1.3	Профильный формат	38
11		39
11.1	Разреженный формат	39
11.1.1	Строчно столбцовый формат	39
11.1.2	Решение СЛАУ. Метод Гаусса	40
11.1.3	Обратный ход Гаусса	41

Лекция 1

Лекция 2

Лекции 1 и 2

2.1 Теория погрешности

Отклонение от теоретического решения Виды погрешности:

1. Неустраняемая погрешность

Пример. Физические величины, другие константы

2. Устраняемая погрешность Связана с методом решения

- (a) Погрешность модели

Связана с математической формулировкой задачи. Она плохо отображает реальную модель

- (b) Остаточная погрешность (Погрешность аппроксимации)

- (c) Погрешность округления

- (d) Накапливаемая погрешность

Нецелые числа

-
- X^* — точное решение

- X — Приближенное решение

- $X^* - X$ — погрешность

- $\Delta X = |X^* - X|$ — абсолютная погрешность

$\Delta_X \geq |X^* - X|$ — предельная абсолютная погрешность, т.е.

$$X - \Delta_X \leq X^* \leq X + \Delta_X$$

- $\delta X = \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$ — относительная погрешность

$\delta_X \geq \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$ — предельная относительная погрешность

2.1.1 Значащие цифры

Определение. Все цифры в изображении отличные от нуля, и нули если они содержатся между значащими цифрами, или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряды точности. Нули стоящие левее, отличной от нуля цифры, не являются значащими цифрами. Между ненулевыми, или указывающие на точность

Пример. $\underbrace{0.00}_{\text{незнач.}} 2080$

Пример. $689000 = 0.689 \cdot 10^6$ — 3 значащие цифры $689000 = 0.689000 \cdot 10^6$ — 6 значащих цифр

2.1.2 Верные цифры

Если, значащая цифра приближенного значения, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие — абсолютное значение погрешности не превосходит половину единицы этого разряда $\Delta \leq 0.5 \cdot 10^k$, где k — номер разряда, то она называется верной

Пример. $a = 3.635$
 $\Delta a = 0.003$

$$(3) \quad k = 0 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$$

$$(6) \quad k = -1 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-1} = 0.05 \geq \Delta a$$

$$(3) \quad k = -2 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-2} = 0.005 \geq \Delta a$$

$$(5) \quad k = -3 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0.0005 < \Delta a \Rightarrow 5 \text{ — сомнительная цифра}$$

2.1.3 Распространение погрешности

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

$$\sqrt{2}$$

$$\frac{7}{5} = 1.4$$

$$\frac{17}{12} = 1.41666$$

$$\frac{707}{500} = 1.414$$

$$\sqrt{2} = 1.4142145624$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{x \pm y} &= \Delta_x \pm \Delta_y \\
\Delta_{(x \cdot y)} &\approx |Y| \Delta_X + |X| \Delta_Y \\
\Delta_{(\frac{x}{y})} &\approx \left| \frac{1}{Y} \right| \Delta_X + \left| \frac{X}{Y^2} \right| \Delta_Y \\
|\Delta u| &= |f(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, \dots, x_n)| \\
|\Delta u| &\approx |df(x_1, \dots, x_n)| = \left| \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i \right| \leq \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \quad (2.1) \\
|\delta u| &= \frac{2.1}{|u|} = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{1}{u} \right| \cdot |\Delta x_i| = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \ln u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \\
\delta_u &= \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \ln u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \\
\delta_{(X \pm Y)} &= \left| \frac{X}{X \pm Y} \right| \delta_X + \left| \frac{Y}{X \pm Y} \right| \delta_Y \\
\delta_{(X \cdot Y)} &= \delta_X + \delta_Y \\
\delta_{(\frac{X}{Y})} &= \delta_X + \delta_Y
\end{aligned}$$

Пример. $x = \frac{7}{5}$

- $f_1 = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1} \right)$

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

- $f_2 = (\sqrt{2} - 1)^6$

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

- $f_3 = (3 - 2\sqrt{2})^3$

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

- $f_4 = 99 - 70\sqrt{2}$

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

Пример.

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

Вычислить корни.

- $y = 70 - \sqrt{4899}$
 $\sqrt{4899} = 69.992 \dots$
 $\sqrt{4899} \approx 69.99$
 $y \approx 70 - 69.99 = 0.01$

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

$$\sqrt{4899} = 69.99; 70 + 69.99 = 139.99$$

$$y = \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.007143$$

2.2 Одномерная минимизация функций

2.2.1 Унимодальные функции

$$f(x) \rightarrow \min, x \in U$$

$$f(x) \rightarrow \max \Rightarrow -f(x) \rightarrow \min$$

$$x^* \in U — \text{точка минимума: } f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in U$$

U^* — множество точек минимума

$$\tilde{x} \in U : \exists V(\tilde{x}) \quad \forall x \in V \quad f(\tilde{x}) \leq f(x) — \text{локальный минимум}$$

Определение. $f(x)$ — **унимодальная функция** на $[a, b]$, если:

1. $f(x)$ — непрерывна на $[a, b]$
2. $\exists \alpha, \beta : a \leq \alpha \leq \beta \leq b$
 - (а) Если $a < \alpha$, то $[a, \alpha]$ $f(x)$ — монотонно убывает
 - (б) Если $\beta < b$, то на $[\beta, b]$ $f(x)$ — монотонно возрастает
 - (с) $\forall x \in [\alpha, \beta] \quad f(x) = f^* = \min_{[a, b]} f(x)$

Примечание. Свойства:

1. Любая из точек локального минимума является глобальным минимумом на этом же отрезке
2. Функция унимодальная на $[a, b]$ унимодальна на $[c, d] \subset [a, b]$
3. $f(x)$ унимодальна на $[a, b]$ $a \leq x_1 < x_2 \leq b$
 - (а) если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$
 - (б) если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, b]$

Определение. $f(x)$ **выпукла** на $[a, b]$, если:

- $\forall x', x'' \in [a, b]$ и $\alpha \in [0, 1]$:

$$f(\alpha x' + (1 - \alpha)x'') \leq \alpha f(x') + (1 - \alpha)f(x'')$$

Примечание. Свойства:

1. Если $f(x)$ на $[a, b]$ $[x', x''] \subset [a, b]$
2. Всякая выпуклая и непрерывная функция на $[a, b]$ является унимодальной на этом отрезке. Обратное не верно

Определение. $x : f'(x) = 0$ — **стационарная точка**

2.2.2 Прямые методы

Не требуют вычисление производной. Могут использовать только известные значения.

1. Метод дихотомии

$$x_1 = \frac{b + a - \delta}{2} \quad x_2 = \frac{b + a + \delta}{2} \quad (2.2)$$

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

$$X^*[a_i, b_i] \quad \frac{b_i - a_i}{2} \leq \varepsilon$$

(a) x_1 и x_2 ; вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$

(b) $f(x_1)$ и $f(x_2)$

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

(c) $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$ (n — номер итерации)

- Если $\varepsilon_n > \varepsilon$ — переход к следующей итерации (шаг 1)
- Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, завершить поиск (шаг 4)

(d) $x^* \approx \bar{x} = \frac{a+b}{2} \quad f^* \approx f(\bar{x})$

2.2 $\delta \in (0, 2\varepsilon)$

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

Лекция 3

3.1 Одномерный поиск

3.1.1 Метод золотого сечения

Примечание. Возьмем отрезок $[0, 1]$

- $x_2 = \tau \Rightarrow x_1 = 1 - \tau$
- $x_1 \Rightarrow x'_2 = 1 - \tau \in [0, \tau]$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\tau}{1 - \tau} \Rightarrow \tau^2 = 1 - \tau$$

$$\tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.61803$$

- $x_1 = 1 - \tau = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}$

- $x_2 = \tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$

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

2. $x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a)$

$$\Delta_n = \tau^n(b - a)$$

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

ε — задано. Окончание: $\varepsilon_n \leq \varepsilon$

На n -ой итерации: $x^* = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$

$$n \geq \frac{\ln \left(\frac{2\varepsilon}{b-a} \right)}{\ln \tau} \approx 2.1 \ln \left(\frac{b-a}{2\varepsilon} \right)$$

Алгоритм.

1. x_1, x_2 по формулам 1 и 2

$$\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \quad \varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$$

2. $\varepsilon_n > \varepsilon$ — шаг 3, иначе 4

3. Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то:

- запоминаем $f(x_1)$
- $b = x_1$
- $x_2 = x_1$
- $x_1 = a + \tau(b-a)$

Иначе:

- запоминаем $f(x_2)$
- $a = x_1$
- $x_1 = x_2$
- $x_2 = b - \tau(b-a)$

$\varepsilon_n = \tau \varepsilon_n$, переход к шагу 2

4. $x^* = \bar{x} = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$
 $f^* \approx f(\bar{x})$

3.1.2 Метод Фибоначчи

$$F_{n+2} = F_{n+1} + F_n, \quad n = 1, \quad F_1 = F_2 = 1$$

$$F_n = \left(\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^n \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$F_n \approx \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \quad n \rightarrow \infty$$

Итерация 0:

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

Итерация k :

•

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

•

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

Итерация n :

$$\bullet \quad x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+1}}(b_0 - a_0)$$

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

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

Как выбирать n :

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

Когда n большое $\Rightarrow \frac{F_n}{F_{n+2}}$ — бесконечная десятичная дробь

3.1.3 Метод парабол

$$\bullet \quad x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$$

$$\bullet \quad x_1 < x_2 < x_3$$

$$\bullet \quad f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3)$$

$$q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$$

$$\bullet \quad q(x_1) = f(x_1) = f_1$$

$$\bullet \quad q(x_2) = f(x_2) = f_2$$

$$\bullet \quad q(x_3) = f(x_3) = f_3$$

$$\bullet \quad a_0 = f_1$$

$$\bullet \quad a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}$$

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

$$\bar{x} = \frac{1}{2} \left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right) \text{ — минимум параболы } q(x)$$

Лекция 4

$$\frac{l_{\text{з.с}}^i}{l_{\text{дых.}}^i} \approx (0.87 \dots)^n$$

$$\frac{l_{\text{з.с}}^i}{l_{\text{Фиб.}}^i} \approx 1.17$$

4.1 Одномерная оптимизация

4.1.1 Определение интервала неопределенности

x_0

1. Если $f(x_0) > f(x_0 + \delta)$, то:

- $k = 1$
- $x_1 = x_0 + \delta$
- $h = \delta$

иначе если $f(x_0) > f(x_0) - \delta$, то:

- $x_1 = x_0 - \delta$
- $h = -\delta$

2. Удваиваем h :

- $h = 2h$
- $x_{k+1} = x_k + h$

3. Если $f(x_k) > f(x_{k+1})$, то:

- $k = k + 1$
- переходим к шагу 2

Иначе:

- прекращаем поиск $[x_{k-1}, x_{k+1}]$

4.2 Методы с использованием производной

- $f(x)$ — дифференцируемая или дважды дифференцируемая выпуклая функция
- вычисление производных в заданных точках

$f'(x) = 0$ — необходимое и достаточное условие глобального минимума.
Если $x^* \in [a, b]$ $f'(x) \approx 0$ или $f'(x) \leq \varepsilon$ — условие остановки вычислений

4.2.1 Метод средней точки

$$f'(x) \quad \bar{x} = \frac{a+b}{2}$$

- Если $f'(\bar{x}) > 0$, то $\bar{x} \in$ монотонно возрастающая $f(x)$, минимум на $[a, \bar{x}]$
- Если $f'(\bar{x}) < 0$ минимум на $[\bar{x}, b]$
- Если $f'(\bar{x}) = 0$ то $x^* = \bar{x}$

Алгоритм

1. $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$, вычислим $f'(\bar{x}) \rightarrow$ шаг 2
2. Если $|f'(\bar{x})| \leq \varepsilon$, то $x^* = \bar{x}$ и $f(x^*) = f(\bar{x}) \rightarrow$ завершить
3. Сравнить $f'(\bar{x})$ с нулем:
 - Если $f'(\bar{x}) > 0$, то $[a, \bar{x}], b = \bar{x}$
 - Иначе $[\bar{x}, b], a = \bar{x}$ \rightarrow шаг 1

$$\Delta_n = \frac{b-a}{2^n}$$

4.2.2 Метод хорд(метод секущей)

Если на концах $[a, b]$ $f'(x)$: $f'(a) \cdot f'(b) < 0$ и непрерывна, то на (a, b)
 $\exists x$ $f'(x) = 0$
 $f(x)$ — минимум на $[a, b]$, если $f'(x) = 0$, $x \in (a, b)$
 $F(x) = f'(x) = 0$ на $[a, b]$
 $F(a) \cdot F(b) < 0$, \bar{x} — точка пересечения $F(x)$ с осью Ox на $[a, b]$

$$\bar{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b) \quad (4.1)$$

$x^* \in [a, \bar{x}]$ либо $[\bar{x}, b]$

Алгоритм

1. \tilde{x} — вычислим по 4.1
вычислим $f'(\tilde{x}) \rightarrow$ шаг 2
2. Если $|f'(\tilde{x})| \leq \varepsilon$, то:
 - $x^* = \tilde{x}$
 - $f^* = f(\tilde{x})$
 - завершить

Иначе:

- \rightarrow шаг 3
3. Переход к новому отрезку. Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то:
 - $[a, \tilde{x}]$
 - $b = \tilde{x}$
 - $f'(b) = f'(\tilde{x})$

Иначе:

- $[\tilde{x}, b]$
- $a = \tilde{x}$
- $f'(a) = f'(\tilde{x})$

\rightarrow шаг 1

Исключение.

1. $f'(a) \cdot f'(b) > 0$, $f(x)$ — возрастает
 - $x^* = a$
 - $x^* = b$
2. $f'(a) \cdot f'(b)$, **одно из:**
 - $x^* = a$
 - $x^* = b$

4.2.3 Метод Ньютона(метод касательной)

Если выпуклая на $[a, b]$ функция $f(x)$ — дважды непрерывно дифференцируема, то $x^* \in [a, b] : f'(x) = 0$

Пусть $x_0 \in [a, b]$ — начальное приближение к x^*

$F(x) = f'(x)$ — линеаризуем в окрестности x_0

$(x_0, f'(x_0))$, то есть:

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

x_1 —

- следующее приближение к x^*
- пересечение касательной с Ox

При $x = x_1$:

$$F(x_0) + F'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$

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

$\{x_k\}$, $k = 1, 2, \dots$ — итерационная последовательность
 $F(x)$ в точке $x = x_k$ имеет вид:

$$y = F(x_k) + F'(x_k)(x - x_k)$$

$x = x_{k+1}$ $y = 0$:

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

$$f'(x) = 0 \quad x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Итерационный процесс: $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$:

- $x^* \approx x$
- $x^* \approx f(x_k)$

Лекция 5

5.1 Метод Ньютона(продолжение). Вывод через ряд Тейлора

- x_k — текущая оценка решения x^*

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

$$f(x^*) = \min_x f(x) = \min_p f(x_k + p) = \min_p [f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) + \dots] \approx$$

$$\approx \min_p [f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k)]$$

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

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

p — аппроксимация шага: от $x_k \rightarrow x^*$. $x^* \approx x_k + p$

$$x_{k+1} = x_k + p = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \quad (5.1)$$

Главное преимущество метода Ньютона:

- высокая(квадратичная) скорость сходимости
 - если x_k достаточно близка x^* и если $f''(x^*) > 0$, то:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \beta |x_k - x^*|^2, \quad \beta = \text{const} > 0$$

Неудачи в методе Ньютона:

1. $f(x)$ плохо аппроксимируется первыми тремя членами в ряде Тейлора.
 x_{k+1} может быть хуже x_k

2. $p = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$ определено только тогда, когда $f''(x_k) \neq 0$
 $f''(x_k) > 0$ — условие минимума квадратичной аппроксимации
 Если $f''(x_k) < 0$ — алгоритм сходится к максимуму
3. Кроме $f(x)$ нужно вычислять $f'(x)$ и $f''(x)$, что в реальных задачах затруднительно

5.1.1 Аппроксимация производных

Правая разностная схема:

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

Центральная разностная схема:

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

порядок точности — $O(h^2)$

5.1.2 Метод Ньютона(продолжение)

Если $f(x)$ — квадратичная функция, то $f'(x)$ — линейная

В 5.1 точное равенство, и следовательно метод Ньютона сходится за один шаг, при любом выборе x

Пусть $x^* \in [a, b]$ и $f(x)$ — трижды непрерывно дифференцируемая и выпуклая на $[a, b]$ функция.

$\{x_k\}$ будет сходиться к пределу x^* монотонно, если:

$$0 < \frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} < 1$$

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

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

Итерационная последовательность $\{x_k\}$ монотонна, если $\frac{f'''(x)}{f'(x_k)} > 0$, то есть достаточное условие ...

Пример.

$$f(x) = x \cdot \arctg(x) - \frac{1}{2} \ln(1 + x^2)$$

, пусть $|f'(x)| \leq 10^{-7}$

1 `from sympy import *`

$$f'''(x) = -\frac{2x}{(1+x^2)^2}$$

$$f'(x)''(x) < 0$$

Выбор начального приближение $x_0 = 1$

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

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$
0	1	0.785	$\frac{1}{2}$
1	-0.57	-0.518	0.754
2	0.117	0.116	...
3
4	$9 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-8}$...

Выполнилось условие $|f'(x_k)| \leq 10^{-7}$ — окончание итерационного процесса.
 $x \approx 9 \cdot 10^{-8} \approx 0$

5.1.3 Модификации метода Ньютона

1. Метод Ньютона-Рафсона

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

$\tau_k = \tau = const$ ($\tau = 1$ — метод Ньютона)

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

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

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

2. Метод Маркрафта

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k) + \mu_k}, \quad \mu_k > 0$$

μ_0 рекомендуется выбирать на порядок больше значения второй производной в x_0

μ_{k+1} : $\mu_{k+1} = \frac{\mu_k}{2}$, если $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, иначе $\mu_{k+1} = 2 \cdot \mu_k$

5.1.4 TODO Метод минимизации многомодальных функций

1. Метод ломанных Условие Липшица: $f(x)$, $x \in [a, b]$ будет удовлетворять условию, если:

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|, \quad \forall x_1, x_2 \in [a, b]$$

Лекция 6

6.1 Постановка задачи

1. $x^* = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, $x_i \in U \subset E_n$, где U — множество допустимых значений, E_n — евклидово пространство размера n . $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$.
Если ставится задача найти максимум, то можно перейти к поиску минимума: $f(x^*) = \max_{x \in U} f(x) = -\min_{x \in U} (-f(x))$
2. $f(x^*) = \text{extr}_{x \in U} f(x)$
3. Если U задается ограничением на вектор x , то задача поиска условного экстремума. Если $U = E_n$ — не имеет ограничений, то задача поиска безусловного экстремума
4. Решение задачи поиска экстремума — пара $(x^*, f(x^*))$

Если $\forall x \in U \ f(x^*) \leq f(x)$ — то x^* — глобальный минимум. Локальный минимум $x^* \in U$: если $\exists \varepsilon > 0$, что $\forall x \in U$ и $\|x - x^*\| < \varepsilon$, то $f(x^*) \leq f(x)$

Определение. Поверхностью уровня функции $f(x)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянные значения, т.е. $f(x) = \text{const}$

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

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

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

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

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

1. $H(x)$ — симметричная, размер nn
2. Антиградиент: вектор, равный по модулю вектору градиента, но противоположный по направлению. Указывает в сторону наибольшего убывания функции $f(x)$
- 3.

$$\nabla f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = \nabla f(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H(x) \Delta x + o(\|\Delta x\|^2)$$

$o(\|\Delta x\|^2)$ — сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго, $\Delta x^T H(x) \Delta x$ — квадратичная форма

6.1.1 Свойства квадратичных форм

Квадратичная форма $\Delta x^T H(x) \Delta x$ (и соответствующая матрица $H(x)$) называется:

- положительно определенной $H(x) > 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x > 0$
- отрицательно определенной $H(x) < 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x < 0$
- положительно полуопределенной $H(x) \geq 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x \geq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$
- отрицательно полуопределенной $H(x) \leq 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x \leq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$
- неопределенной, если $\exists \Delta x, \Delta \tilde{x} : \Delta x^T H(x) \Delta x > 0, \Delta \tilde{x}^T H(x) \Delta \tilde{x} < 0$
- тождественно равной нулю $H(x) \equiv 0$, если $\forall \Delta x \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$

6.1.2 Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций

Определение. Пусть $x, y \in E_n$. Множество точек вида $\{z\} \subset E_n : z = \alpha x + (1 - \alpha)y, \alpha \in [0, 1], z$ — отрезок, соединяющий x и y .

Пример. $E_n : n \leq 3: z$ — отрезок(обычный)

Определение. $U \subset E_n$ выпуклое, если вместе с точками x и $y \in U$ оно содержит и весь отрезок $z = \alpha x + (1 - \alpha)y, \alpha \in [0, 1]$

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

- выпуклой, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha \in [0, 1]$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$
- строго выпуклой, если $\forall \alpha \in (0, 1)$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$
- сильно выпуклой с константой $l > 0$, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha \in [0, 1]$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - \frac{l}{2}\alpha(1 - \alpha)\|x - y\|^2$

Свойства:

1. Функция $f(x)$ выпуклая, если ее график целиком лежит не выше отрезка, соединяющего две ее произвольные точки
Функция $f(x)$ строго выпуклая, если ее график лежит целиком ниже отрезка, соединяющего две ее произвольные, но не совпадающие точки
2. Если функция $f(x)$ сильно выпуклая, то она одновременно строго выпуклая и выпуклая
Если функция $f(x)$ строго выпуклая, то она одновременно выпуклая
3. Выпуклость функции можно определить по матрице Гессе $H(x)$
 - Если $H(x) \geq 0 \forall x \in E_n$, то $f(x)$ выпуклая
 - Если $H(x) > 0 \forall x \in E_n$, то $f(x)$ строго выпуклая
 - Если $H(x) \geq lE \forall x \in E_n$, где E — единичная матрица, то $f(x)$ сильно выпуклая

Свойства выпуклых функций:

1. Если $f(x)$ выпуклая функция на выпуклом множестве U , то всякая точка локального минимума есть точка глобального минимума на U
2. Если выпуклая функция достигает своего минимума в двух различных точках, то она достигает минимума во всех точках отрезка, соединяющих эти точки.
3. Если $f(x)$ строго выпуклая функция множества U , то она может достигнуть своего глобального минимума на U не более чем в одной точке

6.1.3 Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума

Теорема 6.1.1 (Необходимое условие экстремума первого порядка). Пусть $x^* \in E_n$ — локальный минимум или максимум $f(x)$ на E_n и $f(x)$ — дифференцируема в точке x^*

Тогда $\nabla f(x)$ в точке x^* равен нулю $\nabla f(x^*) = 0$, т.е.

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = \overline{1, n}$$

Определение. Точки $x^* : \nabla f(x^*) = 0$ — **стационарные**

Теорема 6.1.2 (Необходимое условие экстремума второго порядка). Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума или максимума $f(x)$ на E_n и $f(x)$ — дважды дифференцируемая в точке.

Тогда $H(x^*)$ — является положительно или отрицательно(если максимум) полуопределенной, т.е. $H(x^*) \geq 0$ или $H(x^*) \leq 0$ (если максимум)

Теорема 6.1.3 (Достаточное условие экстремума). Пусть $f(x)$ в $x^* \in E_n$ дважды дифференцируема, ее $\nabla f(x) = 0$, а $H(x^*) > 0$ или $H(x^*) < 0$ (для максимума).

Тогда x^* — точка локального минимума(максимума) $f(x)$ на E_n

1. Проверка выполнения условий

- вычисление угловых миноров $H(x)$
 - вычисление главных миноров $H(x)$
- (а) Исследование положительной или отрицательной определенности угловых и главных миноров
 - (б) Анализ собственных значений матрицы $H(x)$

Лекция 7

7.1 Критерии Сильвестра

7.1.1 Достаточный условия

1. $H(x^*) > 0$ и x^* — локальный минимум $\Leftrightarrow \Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \dots, \Delta_n > 0$
2. $H(x^*) < 0$ и x^* — локальный максимум $\Leftrightarrow \Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \dots, (-1)^n \Delta_n > 0$

, где Δ_i — угловой минор

7.1.2 Необходимые условия

1. $H(x^*) \geq 0$ и x^* — может быть локальный минимум $\Leftrightarrow \Delta_1 \geq 0, \Delta_2 \geq 0, \dots, \Delta_n \geq 0$
2. $H(x^*) \leq 0$ и x^* — может быть локальный максимум $\Leftrightarrow \Delta_1 \leq 0, \Delta_2 \geq 0, \dots, (-1)^n \Delta_n \geq 0$

, где Δ_i — главный минор

7.2 Собственные значения

Определение. Собственные значения λ_i ($i = 1..n$) $H(x^*)_{n \times n}$ находятся как корни характеристического уравнения $|H(x^*) - \lambda E| = 0$. Если $H(x)$ — вещественная, симметричная матрица, то λ_i — вещественные

7.3 Общие приципы многомерной оптимизации

7.3.1 Выпуклые квадратичные функции

$$f(x) = \frac{1}{2}ax^2 + bx + c$$

Определение. Функция вида

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^n b_j x_j + c \quad (7.1)$$

Называется **квадратичной функцией n переменных**

Положим $a_{ij} = a_{ij} + a_{ji} \Rightarrow$ симметрия. матрица A

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

, где $b = (b_1, \dots, b_n)^T \in E_n$ — вектор коэффициентов, $x = (x_1, \dots, x_n)^T$. x, y — скалярное произведение Свойства квадратичных функций:

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

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^n b_j x_j + c \right) =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (a_{ik} + a_{ki}) x_i + b_k = \sum_{i=1}^n a_{ki} x_i + b_k$$

$$2. H(x) = A, \text{ где } H(x) \text{ — Гессиан}$$

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

3. Квадратичная функция $f(x)$ с положительно определенной матрицей A сильно выпукла

$$A = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{vmatrix}$$

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

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

7.3.2 Принципы многомерной оптимизации

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min, \quad x \in E_n \\ x^{k+1} &= \Phi(x^k, x^{k+1}, \dots, x^0), \quad x^0 \in E_n \end{aligned} \quad (7.2)$$

— итерационная процедура(общего вида)

$\{x^k\}$:

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) &= f^* = \min_{E_n} f(x), \quad \text{если } U^* \neq \emptyset \\ \lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) &= f^* = \inf_{E_n} f(x), \quad \text{если } U^* = \emptyset \end{aligned}$$

, где U^* — множество точек глобального минимума функции $f(x)$
 $\{x^k\}$ + условие 7.2 = минимизирующая последовательность для $f(x)$
 Если для $U^* \neq \emptyset$ выполняется условие

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho(x^k, U^*) = 0$$

, то x^k сходится к множеству U^* . Если U^* содежит единственную точку x^* , то для $\{x^k\}$ сходящейся к U^* будет справедливо $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$

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

Примечание. Минимизирующая последовательность $\{x^k\}$ может и не сходиться к точке минимума

Теорема 7.3.1 (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

1. Скорость сходимости(минимизирующих последовательностей)

Определение. $\{x^k\}$ сходится к точке x^* **линейно** (со скоростью геометрической последовательности), если $\exists q \in (0, 1)$:

$$\begin{aligned} \rho(x^k, x^*) &\leq q \rho(x^{k-1}, x^*) \\ \rho(x^k, x^*) &\leq q^k \rho(x^0, x^*) \end{aligned} \quad (7.3)$$

Определение. Сходимость называется **сверхлинейной** если

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

, и $q_k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} +0$

Определение. **Квадратичная сходимость:**

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

2. Критерии окончания итерационного процесса

$$\begin{aligned}
\rho(x^{k+1}, x^*) &< \varepsilon_1 \\
|f(x^{k+1}) - f(x^k)| &< \varepsilon_2 \\
\|\nabla f(x^k)\| &< \varepsilon_3
\end{aligned} \tag{7.4}$$

, где ε_i — заранее заданные точности

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad k = 0, 1, \dots \tag{7.5}$$

, где p^k — направление поиска из x^k в x^{k+1} , α_k — величина шага

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

— условие выбора α_k

Определение. В итерационном процессе 7.5 производится **исчерпывающий спуск**, если величина шага α_k находится из решения одномерной задачи минимизации:

$$\Phi_k(\alpha) \rightarrow \min_{\alpha}, \quad \Phi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k) \tag{7.6}$$

Теорема 7.3.2. Если функция $f(x)$ дифференцируема в пространстве E_n , то в итерационном процессе 7.5 с выбором шага с ичерпывающим спуском для любого $k \geq 1$:

$$(\nabla f(x^{k+1}), p^k) = 0 \tag{7.7}$$

— это значит что эти два вектора ортогональны

для $\Phi_k(\alpha)$ необходимое условие минимума функции:

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

$$\text{учитывая } x_j^{k+1} = x_j^k + \alpha p_j^k \Rightarrow \frac{dx_j^k}{d\alpha} = p_j^k$$

Теорема 7.3.3. Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c$ величина α_k исчерпывающего спуска в итерационном процессе

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad \alpha_k = 0, 1, \dots$$

равна

$$\alpha_k = -\frac{(\nabla f(x^k), p^k)}{(Ap^k, p^k)} = -\frac{(Ax^k + b, p^k)}{(Ap^k, p^k)} \tag{7.8}$$

Лекция 8

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

$$f(x^k + \alpha p^k) < f(x^k)$$

Теорема 8.0.1 (достаточное условие направления убывания). Пусть функция $f(x)$ дифференцируема в точке x^k . Если вектор p^k удовлетворяет условию:

$$(\nabla f(x^k), p^k) < 0$$

, то направление вектора p^k является направлением убывания

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

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) - f(x^k) &= f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) = (\nabla f(x^k), \alpha p^k) + o(\alpha) = \\ &= \alpha \left((\nabla f(x^k), p^k) + \frac{o(\alpha)}{\alpha} \right) < 0 \end{aligned}$$

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

Примечание. Геометрическая интерпретация $(\nabla f(x^k), p^k) < 0 \implies p^k$ составляет тупой угол с $\nabla f(x^k)$

$f(x)$ дифференцируема в E_n :

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \quad (8.1)$$

где p^k определяется с учетом информации о частных производных, а величина шага $\alpha_k > 0$, такова, что:

$$f(x^{k+1}) < f(x^k) \quad k = 0, 1, \dots \quad (8.2)$$

Останов итерационного процесса: $\|\nabla f(x^k)\| < \varepsilon$

8.1 Метод градиентного спуска

В 8.1: $p^k = -\nabla f(x^k)$ — предположение. Если $\nabla f(x^k) \neq 0$, то $(\nabla f(x^k), p^k) < 0$, следовательно p^k — направление убывания функции $f(x)$, в малой окрестности точки x^k направление p^k обеспечивает наискорейшее убывание этой функции. Таким образом можно найти такое $\alpha_k > 0$, что выполнится 8.2

Алгоритм 1 метод Градиентного спуска

Ввод $\varepsilon > 0, \alpha > 0, x \in E_k, f(x)$

- 1: **повторять**
 - 2: Вычисляем $\nabla f(x)$
 - 3: **если** Выполнено условие достижения точности $\|\nabla f(x)\| < \varepsilon$ **тогда**
 - 4: **Вернуть** $x^* := x, f^* := f(x^*)$
 - 5: **конец если**
 - 6: **повторять**
 - 7: Найти $y := x - \alpha \nabla f(x)$
 - 8: Вычислить $f(y)$
 - 9: **если** $f(y) < f(x)$ **тогда**
 - 10: $x := y$
 - 11: $f(x) := f(y)$
 - 12: Выйти из цикла
 - 13: **иначе**
 - 14: $\alpha := \frac{\alpha}{2}$
 - 15: **конец если**
 - 16: **конец повторять**
 - 17: **конец повторять**
-

Примечание. В окрестности стационарной точки функции $f(x)$ величина $\|\nabla f(x)\|$ становится малой, это приводит к замедлению сходимости последовательности $\{x^k\}$. Поэтому в 8.1 иногда полагают

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

Теорема 8.1.1. Пусть симметричная матрица A квадратичной функции $f(x)$ положительно определена, а l и L — наименьшее и наибольшее собственное значение A . Тогда при любых $\alpha \in (0, \frac{2}{L})$ и $x^0 \in E_n$

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

сходится к единственной точке глобального минимума x^* функции $f(x)$ линейно (со скоростью геометрической прогрессии)

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

, где $q = \max\{|1 - \alpha l|, |1 - \alpha L|\}$

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

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

Оценим норму разности

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

— из определения линейной сходимости, где q — оценка нормы матрицы через величину ее собственных значений

$$\|E - \alpha A\| \leq q = \max\{|1 - \alpha l|, |1 - \alpha L|\}$$

Если $\alpha \in (0; \frac{2}{L})$, то $q < 1$

q: $q^* = \frac{L-l}{L+l}$, при $\alpha = \alpha^* = \frac{2}{L+l}$. Т.к. $l < L$, то $1 - \alpha l = -(1 - \alpha L)$. От соотношения L и l существенно зависит число итераций градиентного метода при минимизации выпуклой квадратичной функции \square

Пример. $L = l > 0$, тогда точка минимума находится за один шаг

$$\begin{aligned} f(x) &= x_1^2 + x_2^2 \rightarrow \min \\ x^0 &= (1, 1)^T \quad \alpha = \alpha^* = \frac{2}{l + L} \end{aligned}$$

Решение.

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \implies l = L = 2 \\ \alpha^* &= \frac{2}{2+2} = \frac{1}{2} \\ x^1 &= x^0 - \frac{1}{2} \nabla f(x^0) = (0, 0)^T \\ x^1 &= x^* \end{aligned}$$

Примечание. При $l = L$ — линии уровня $f(x)$ — концентрические окружности

Примечание. $L \gg l > 0$ — линии уровня $f(x)$ — эллипсы

Пример.

$$\begin{aligned} f(x) &= x_1^2 + 100x_2^2 \rightarrow \min \\ x^0 &= (1, 1)^T \\ \alpha &= \alpha^* \end{aligned}$$

Решение.

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

Линии уровня — эллипсы сильно вытянутые вдоль оси Ox_1

$$\alpha = \alpha^* = \frac{2}{202} = \frac{1}{101}$$

$$-\nabla f(x^0) = (-2, -200)^T$$

— сильно отличается от $x^* - x^0$

$$x^* - x^0 = (-1, -1)^T$$

— направление точки глобального минимума

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

$$\nabla f(x^k) = (2x_1, 200x_2)^T$$

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \frac{99}{101}x_1^k \\ x_2^{k+1} = -\frac{99}{101}x_2^k \end{cases}$$

— закон изменения координат точек, минимизирующей последовательности. $\{x^k\}$ — сходится медленно

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

- Если μ велико, то линии уровня сильно вытянуты и говорят что функция имеет **овражный** характер (резко меняется по одним направлением и слабо по другим) \implies Полохо обусловленная задача
- Если $\mu \sim 1$, то линии уровня близки к окружностям и задача является хорошо обусловленной

8.2 Метод наискорейшего спуска

После вычисления в начальной точке градиента функции делают в направлении антиградиента не маленький шаг, а передвигаются до тех пор, пока функция убывает. Достигнув точки минимума на выбранном направлении снова вычисляют градиент функции и повторяют описанную процедуру

$$p^k = -\nabla f(x^k)$$

α_k — находится из решения задачи одномерной оптимизации

$$\Phi_k(\alpha) \rightarrow \min$$

$$\Phi_k(\alpha) = f(x^k - \alpha \nabla f(x^k)) \quad \alpha > 0 \quad (8.3)$$

Алгоритм 2 метод наискорейшего спуска

Ввод $\varepsilon > 0, x \in E_k, f(x)$

- 1: **повторять**
 - 2: Вычислить $\nabla f(x)$
 - 3: **если** $\|\nabla f(x)\| < \varepsilon$ **тогда**
 - 4: **Вернуть** $x^* := x, f^* := f(x)$
 - 5: **конец если**
 - 6: Решить задачу одномерной оптимизации 8.3 для $x^k := x$, т.е. найти α^*
 - 7: $x := x - \alpha^* \nabla f(x)$
 - 8: **конец повторять**
-

Определение. Ненулевые векторы p^1, \dots, p^k называются сопряженными относительно матрицы A размера $n \times n$ или A -ортогональными, если

$$(Ap^i, p^j) = 0 \quad i \neq j \quad i, j = 1, \dots, k$$

Примечание. Система из n векторов p^1, \dots, p^n сопряженных относительно положительно определенной матрицы A линейно независима

Примечание. n ненулевых A -ортгоналиных векторов образуют базис в E_n . Рассмотрим минимизацию квадратичной функции в E_n

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

A — положительно определенная. Итерационный процесс

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \quad k = 1, 2, \dots \quad (8.4)$$

, где p^k — A -ортогональные

Примечание. Если в итерационном процессе 8.4 на каждом шаге используется исчерпывающий спуск, то

$$\alpha_k = -\frac{(\nabla f(x^0), p^k)}{(Ap^k, p)} \quad k = 1, 2, \dots \quad (8.5)$$

Доказательство.

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k = x^0 + \sum_{i=1}^k \alpha_i p^i \quad (8.6)$$

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

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

домножим на p^k и учитываем $(\nabla f(x^k), p^k) = 0$, A -ортогональность p^k

$$(\nabla f(x^0), p^k) + \alpha_k (Ap^k, p^k) = 0$$

, т.к. A — положительно определена, то $(Ap^k, p^k) > 0$, и для α_k :

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

□

Лекция 9

9.1 Метод сопряженных градиентов

$$\begin{aligned}x^{k+1} &= x^k + \alpha_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \\p^k &= -\nabla f(x^*)\end{aligned}\tag{9.1}$$

Направление убывания может носить зигзагообразный характер. Будем находить вектор p^k не только через антиградиент, но и через p^{k-1} .

$$p^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k p^k\tag{9.2}$$

β_k выбираются так, чтобы получалась последовательность A -ортогональных векторов p^0, p^1, \dots . Из условия:

$$\begin{aligned}(Ap^{k+1}, p^k) &= 0 \\ \beta_k &= \frac{(A\nabla f(x^{k+1}), p^k)}{(Ap^k, p^k)}\end{aligned}\tag{9.3}$$

Для квадратичных функция:

$$\alpha_k = -\frac{(\nabla f(x^k), p^k)}{(Ap^k, p^k)}\tag{9.4}$$

Утверждение: итерационный процесс, который описывается формулами [9.1](#), [9.2](#), [9.3](#), [9.4](#), с положительно определенной симметричной матрицей A дает точки x^0, \dots, x^k и векторы, такие что если $\nabla f(x^i) \neq 0, 0 \leq i < k \leq n-1$, то векторы p^0, \dots, p^k — A -ортогональны, а градиенты $\nabla f(x^0), \dots, \nabla f(x^i)$ — взаимно ортогональны.

Т.к. p^k в [9.2](#) A -ортогональны, то метод гарантирует нахождение точки минимума сильно выпуклой квадратичной функции не более чем за n шагов

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \quad x^0 \in E_k \quad p^0 = -\nabla f(x^0)\tag{9.5}$$

$$f(x^k + \alpha_k p^k) = \min_{\alpha > 0} f(x^k + \alpha p^k) \quad k = 0, 1, \dots\tag{9.6}$$

$$p^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k p^k \quad k = 0, 1, \dots\tag{9.7}$$

$$\beta_k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2} \quad (9.8)$$

Точное определение α_k возможно только в редких случаях, т.к. p^k могут быть не A -ортогональными. В этом методе используется следующий практический прием: через N шагов производится обновление метода, т.е. $\beta_{m \cdot N} = 0$ $m = 1, 2, \dots$, где $m \cdot N$ — момент обновления метода (рестарта), часто полагают $N = n$ — размерность пространства E_n . Рестарт необходим для устранения накопленной погрешности метода, из-за которой вектора p^k перестанут указывать на направление убывания функции $f(x)$.

Если функция хорошо аппроксимируется квадратичной функцией, то метод сопряженных градиентов даст маленькое количество шагов.

9.2 Метод стохастического градиентного спуска

Этот метод по большей части связан с большими выборками. Обычные методы пострадают, из-за дорогого вычисления функции на большом наборе данных.

Наборы разбивают на K тренировочных наборов, части тренировочных наборов размера M называют minibatch. Тогда набор можно представить так:

$$X^{(k)} = \{x_i | i = M_k, \dots, (M_k + M - 1)\}$$

$$Y^{(k)} = \{y_i | i = M_k, \dots, (M_k + M - 1)\}$$

Определяют некоторую функцию, которую будем оптимизировать. Для каждого набора она будет выглядеть так:

$$L^{(k)}(\omega) = \sum_{i=0}^M L(\omega, x_{M_k+i}, y_{M_k+i}) \quad k = 0, \dots, (K - 1)$$

, где ω — точка минимума

Когда определяем функцию для каждого набора, каждая составляющая ω будет находится на мини итерации:

$$\omega_p^{(k+1)} = \omega_p^{(k)} - \eta \cdot \nabla L^{(k)}(\omega_p^{(k)}) \quad k = 0, \dots, (K - 1)$$

$$\omega_{p+1}^{(0)} = \omega_p^{(k)}$$

Большая итерация: $p = 0, 1, \dots$ завершается когда проходим весь набор миниитераций. Такая большая итерация называется эпохой. Когда переходим к следующей эпохе, перемешивает тренировочный набор. В результате перемешивания, элементы будут попадать в разные minibatch'и на каждой эпохе.

9.2.1 Adagrad (модификация)

Предлагается использовать разные η , для каждого minibatch'a.

$$\eta_p = (\eta_p^{(1)}, \dots, \eta_p^{(d)})$$

$$\eta_0 = \text{const} \quad \eta_0^{(i)} = \eta \quad i = 1, \dots, d$$

$$\omega_p = (\omega_p^{(1)}, \dots, \omega_p^{(d)})$$

$$\nabla L(\omega_p) = (g_p^{(1)}, \dots, g_p^{(d)})$$

Определим вспомогательный вектор:

$$G_p^{(i)} = (G_p^{(1)}, \dots, G_p^{(d)})$$

$$G_p^{(i)} = \sum_{j=1}^p (g_j^{(i)})^2 \quad i = 1, \dots, d$$

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

, где e — коэффициент $\sim 1e-8$

$$\omega_{p+1} = \omega_p - \eta_p \odot \nabla L(\omega_p)$$

, где \odot — поэлементное умножение двух векторов

9.3 Метод покоординатного спуска

$$f(x) \rightarrow \min_{x \in E_n}$$

Алгоритм:

- Выбираем вектор $x_0 \in E_n$

$\forall i$:

1. фиксируем значение всех переменных, кроме x_i
2. $f(x_i) \rightarrow \min$ любым методом одномерной оптимизации (золотое сечение наиболее популярный)
3. Проверка выполнения критерия останова:
 - $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon_1$
 - $\|f(x^{k+1}) - f(x^k)\| \leq \varepsilon_2$

Лекция 10

10.1 Формы хранения матриц

Определение. Матрица имеющая достаточное нкбольшое число ненулевых элементов называется **разреженной**

Определение. В ином случае, называется **плотной**

Форматы хранения квадратных матриц:

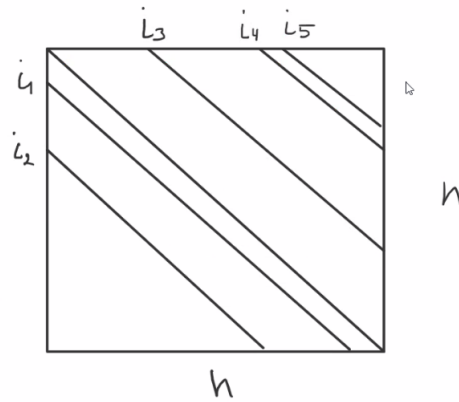
1. Диагональный
2. Ленточный
3. Профильный
4. Разреженный

Характеристики:

1. Симметрия матрицы
2. Верхний и нижний треугольники матрицы
3. Ускоренный доступ к строкам матрицы

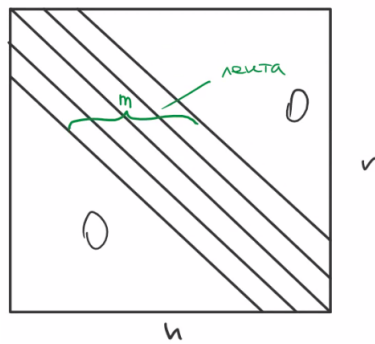
Будем называть ненулевыми элементами, те которые предполагается хранить в памяти.

10.1.1 Диагональный



- $n \times n$, где n — размерность исходной матрицы, m — количество ненулевых диагоналей

10.1.2 Ленточный формат



$a_{ij} = 0$, если $|i - j| > k$, k — полуширина, $m = 2k + 1$ — ширина ленты

Лекция 11

11.1 Разреженный формат

11.1.1 Строчно столбцовый формат

1. Вещественный массив $di[n]$ — диагональные элементы
2. Вещественный массив al, au — по строкам и столбцам соответственно
3. Целочисленный массив ja — содержит номера столбцов (строк) хранимых внедиагональных элементов нижнего(верхнего) треугольника матрицы. $j \leq t$, где t — размерность массивов ja, al, au , $ja[j]$ — номер столбца для $al[j]$, или номер строки для $au[j]$
4. Целочисленный массив $ia, ia[k]$ — равен индексу(в нумерации с 1) с которого начинается k -той строки(столбца)

Размерность ja, al, au : $ia[n + 1] - 1$. $ia[i + 1] - ia[i]$ — количество хранимых внедиагональных элементов i -той строки(столбца) нижнего(верхнего) треугольника. ia и ja — портрет матрицы.

Пример.

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

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

$$ia = [1, 1, 1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12]$$

$$ja = [2, 2, 3, 4, 3, 5, 4, 5, 6, 5, 7]$$

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

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

Для шестой строчки: $ia[6] = 5$ — начало шестой строчки в массиве ja и al .
 $ia[6+1] - ia[6] = 7 - 5 = 2$ — количество элементов.

1. $ja[ia[6]] = ja[5] = 3$
2. $ja[ia[6] + 1] = ja[6] = 5$

11.1.2 Решение СЛАУ. Метод Гаусса

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

$$Ax = b$$

- $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ — вещественные числа
- $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$
- $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$

$-\frac{a_{21}}{a_{11}}, -\frac{a_{31}}{a_{11}}, \dots, -\frac{a_{n1}}{a_{11}}$ Верхний индекс обозначает этап.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + \dots + a_{3n}^{(1)}x_n = b_3^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)}x_2 + a_{n3}^{(1)}x_3 + \dots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{cases}$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}}a_{1j} \quad b_i^{(1)} = b_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}}b_1 \quad i, j = \overline{2, n}$$

Примечание. $a_{11} \neq 0$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 + \dots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n3}^{(2)}x_3 + a_{n4}^{(2)}x_4 + \dots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{cases}$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}a_{2j}^{(1)} \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}b_2^{(1)}$$

$n - 1$ этап:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 + \cdots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} \\ \vdots \\ a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \end{cases}$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} a_{kj}^{(k-1)} \quad b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} b_k^{(k-1)} \quad k \in \overline{1, n}; \quad i, j \in \overline{k+1, n}$$

11.1.3 Обратный ход Гаусса

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \\ &\vdots \\ x_2 &= \frac{b_2^{(1)} - a_{23}^{(1)}x_3 - \cdots - a_{2n}^{(1)}x_n}{a_{22}^{(1)}} \\ x_1 &= \frac{b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n}{a_{11}} \\ x_k &= \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{i=k+1}^n a_{ki}^{(k-1)}x_i}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad k \in \overline{n, 1} \end{aligned}$$

$$\sum_j^n = 0, \text{ если } j > n$$

Алгоритм 3 метод Гаусса

- 1: **для** $k = 1, \dots, n - 1$ **делать**
 - 2: **для** $i = k + 1, \dots, n$ **делать**
 - 3: $t_{ik} = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$
 - 4: $b_i = b_i - t_{ik}b_k$
 - 5: **для** $j = k + 1, \dots, n$ **делать**
 - 6: $a_{ij} = a_{ij} - t_{ik}a_{kj}$
 - 7: **конец для**
 - 8: **конец для**
 - 9: **конец для**
 - 10: $x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$
 - 11: **для** $k = n - 1, \dots, 1$ **делать**
 - 12: $x_k = \frac{(b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}x_j)}{a_{kk}}$
 - 13: **конец для**
-

Модификация с постолбцовым выбором главного элемента

Алгоритм 4 Модификация алгоритма Гаусса

- 1: $m : m \geq k, |a_{mk}| = \max_{i \geq k} \{|a_{ik}|\}$
 - 2: **если** $a_{mk} = 0$ **тогда**
 - 3: Нет однозначного решения. Завершить алгоритм
 - 4: **иначе**
 - 5: **для** $j = k, \dots, n$ **делать**
 - 6: Поменять местами b_x и b_m
 - 7: Поменять местами a_{kj} и a_{mj}
 - 8: **конец для**
 - 9: **конец если**
-