Лекции по Методам оптимизации 4 семестр

Ilya Yaroshevskiy

13 мая 2023 г.

Оглавление

Лекции 1 и 2

1.1 Теория погрешности

Отклонение от теоретического решения Виды погрешности:

1. Неустранимая погрешность

   Пример. Физические величины, другие константы

2. Устранимая погрешнеость Связана с методом решения

   (a) Погрешность модели
   Связана с матиматической формулировкой задачи. Она плохо отображает реальную модель

   (b) Остаточная погрешность(Погрешноть 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 погрешость
  $\delta_X \geq \left|\frac{X^* - X}{|X|}\right|$ — предельная относительная погрешность

1.1.1 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 значащимицифрами 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

1.1.2 Верные цифры

Если, значащая цифра приближенного значения, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие — абсолютное значение погрешности не превосходит половину уиницы 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) $k = 0$ $\frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$

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

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

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

1.1.3 Распространение погрешности

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

$\sqrt{2}$

$$\frac{7}{5} = 1.4$$
$$\frac{17}{12} = 1.41666$$
$$\frac{707}{500} = 1.414$$
$$\sqrt{2} = 1.4142145624$$

$$\Delta_{x \pm y} = \Delta_x \pm \Delta_y$$
$$\Delta_{(x \cdot y)} \approx |Y|\Delta_X + |X|\Delta_Y$$
$$\Delta_{\left(\frac{x}{y}\right)} \approx \left|\frac{1}{Y}\right| \Delta_X + \left|\frac{X}{Y^2}\right| \Delta_Y$$
$$|\Delta u| = |f(x_1 + \Delta x_1, \ldots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, \ldots, x_n)|$$

$$|\Delta u| \approx |df(x_1, \dots, x_n)| = \left|\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i}\Delta x_i\right| \le \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| \cdot |\Delta x_i| \tag{1.1}$$

$$|\delta u| = \frac{1.1}{|u|} = \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{1}{u}\right| \cdot |\Delta x_i| = \sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| \cdot |\Delta x_i|$$

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

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

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

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

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.

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

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

  $\sqrt{4899} = 69.99;\ 70 + 69.99 = 139.99$
  $y = \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.007143$

1.2 Одномерная минимизация функций

1.2.1 Унимодальные функции

$f(x) \to \min,\ x \in U$
$f(x) \to \max \Rightarrow -f(x) \to min$
$x^* \in U$ — точка минимума: $f(x*) \leq f(x)\ \forall x \in U$
U^* — множество точек минимума
$\tilde{x} \in U : \exists V(\tilde{x})\ \forall x \in V\ f(\tilde{x}) \leq f(x)$ — локальный минимум

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

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

Примечание. Свойства:

1. Любая из точек локального минимума является глобальным минимумом на этом же отрезке
2. Функця унимодальная на $[a, b]$ унимодальна на $[c, d] \subset [a, b]$
3. $f(x)$ унимодальна на $[a, b]$ $a \leq x_1 < x_2 \leq b$
   (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. $f(x)$ **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**

1.2.2 Прямые методы

Не требуют вычисление производной. Могут использовать только известные значения.

1. Метод дихотомии

$$x_1 = \frac{b+a-\delta}{2} \quad x_2 = \frac{b+a+\delta}{2} \tag{1.2}$$

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

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

   (a) x_1 и x_2; вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$
   (b) $f(x_1)$ и $f(x_2)$
      - Если $f(x_1) \leq f(x_2) \to [a, x_2]$, т.е. $b = x_2$
      - Иначе $[x_1, b] \to [x_1, b]$, 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 $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, заврешить поиск(шаг 4)
   (d) $x^* \approx \overline{x} = \frac{a+b}{2} \quad f^* \approx f(\overline{x})$

   1.2 $\delta \in (0, 2\varepsilon)$
   Число итерций $n \geq \log_2 \frac{b-a-\delta}{2\varepsilon-\delta}$

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

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

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

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

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

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

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:

- $x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+1}}(b_0 - a_0)$
- $x_2 = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$

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

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

- $x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$
- $x_1 < x_2 < x_3$
- $f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3)$

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

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

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

Лекция 4

$$\frac{l^i_{\text{з.с}}}{l^i_{\text{дих.}}} \approx (0.87\dots)^n$$
$$\frac{l^i_{\text{з.с}}}{l^i_{\text{фиб.}}} \approx 1.17$$

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 заданых 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

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

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

Алгоритм

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

   $\to$ 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 $[a, b]$

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

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

1. $\tilde{x}$ — вычислим по 4.1
   вычислим $f'(\tilde{x}) \to$ шаг 2
2. Если $|f'(\tilde{x})| \leq \varepsilon$, то:

- $x^* = \tilde{x}$
- $f^* = f(\tilde{x})$
- завершить

Иначе:

- $\to$ 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:

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

   $\to$ 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^*

$$F(x) = f'(x) \text{ — линеаризуем в корестнтсти } x_0$$

(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 $x = x_1$:

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

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

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

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

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

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

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

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 $x_k \to x^*$. $x^* \approx x_k + p$

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

Главное преимущество метода Ньютона:

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

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

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:

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

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 сходится к пределе 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 поледовательность $\{x_k\}$ монотонна, если $\frac{f'''(x)}{f'(x_k)} > 0$, то есть достаточное условие монотонной сходимости метода Ньютона: постоянство $x\ in[x^*, x_0]$ занка $f'''(x)$ и совпадение его со сзнаком $f'(x^0)$

Пример.

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

, пусть $|f'(x)| \le 10^{-7}$

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

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

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	$9 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-8}$	…

Выолнилось 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)

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

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

, 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 произвдной 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 Метод минимизации многомодальных функций

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

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

$\forall x_1, x_2 \in [a, b]$

$$\left.\begin{array}{r} x_1^* = \frac{1}{2L}[f(a) - f(b) + L(a + b)] \\ p_1^* = \frac{1}{2}[f(a) + f(b) + L(a - b)] \end{array}\right\} \text{— схема}$$

   (a) вместо (x_1^*, p_1^*)
   - (x_1', p_1)

$$x_1' = x_1^* - \Delta_1$$

   - (x_1'', p_1)

$$x_1'' = x_1^* + \Delta_1$$

$$p_1 = \frac{1}{2}[f(x_1^*) + p_1^*]$$

$$\Delta_1 = \frac{1}{2L}[f(x_1^* - p_1^*)]$$

   (b) Из пар $(x_1', p_1), (x_1'', p_1)$, выбрать ту, у которой вторая компонента p минимальна и обозначить ее (x_2^*, p_2^*) и исключить из рассматриваемого множесвта. Переход к шагу 1

В результате множество пар (x, p). $x^* \approx x_n^*$, $f^* \approx f(x_n^*)$

Пример.

$$f(x) = \frac{\sin(x)}{x} \quad [10, 15] \quad \varepsilon = 0.01$$

$$|f'(x)) = \left|\frac{x\cos x - \sin x}{x^2}\right| < \frac{x|\cos x| + \sin|x|}{x^2} < \frac{x+1}{x^2} \leq 0.11 \; x \in [10, 15]$$

$$L = 0.11$$

$$x_1^* = 12.056 \quad p_1^* = -0.281$$

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 — эвклидово пространство размера n. $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$. Если ствится задача найти максимум, то млжно 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. $f(x) = const$

Определение. Градиентом ∇ f(x) непрерывно жифференцируемой 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 сторну 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 соответсвующая матрица $H(x)$) называется:

- положительно опрделенной $H(x) > 0$, 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 $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x)\Delta x = 0$
- неопределнной, если $\exists \Delta x, \Delta\tilde{x} : \Delta x^T H(x)\Delta x > 0,\ \Delta\tilde{x}^T H(\tilde{x})\Delta\tilde{x} < 0$
- 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 ∈ U) оно содержит и весь отрезок $z = \alpha x + (1-\alpha)y, \alpha \in [0, 1]$

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

- выпуклой, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha[0, 1]$ 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 грфик 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 одноверменно 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 миниума во всех точках отрезка, соединяющих это точки.
3. Если $f(x)$ строго выпуклая функция множества U, то она может достигать 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.

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

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 дииференцируемая 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 $H(x)$

   (a) Исследование положительной или отрицательной определнности угловых и главных миноров
   (b) 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 $\Leftrightarrow \Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \ldots, \Delta_n > 0$
2. $H(x^*) < 0$ и x^* — локальный максимум $\Leftrightarrow \Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \ldots, (-1)^n\Delta_n > 0$

, где Δ_i — угловой минор

7.1.2 Необходимые условия

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

, 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 прицнипы многмерной оптимизации

7.3.1 Выпуклые квадратичные функции

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

Определение. Функция вида

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j + \sum_{j=1}^{n} b_jx_j + c \tag{7.1}$$

Называется **квадратичной функией n перменных**

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 коэффицентов, $x = (x_1, \dots, x_n)^T$. x, y — скалярное произведение Свойства квадратичных функций:

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

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

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

2. $H(x) = A$, где $H(x)$ — Гессиан

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

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 матрцы A и матрицы $A - lE$ — положительны при достаточно малом $l : 0 < l < \lambda_{\min \Rightarrow f(x)}$ — сильно выпукла

7.3.2 Принципы многмерной оптимизации

$$f(x) \to \min,\ x \in E_n$$

$$x^{k+1} = \Phi(x^k, x^{k+1}, \dots x)^0,\ x^0 \in E_n \tag{7.2}$$

— итерициoнная процедура(общего вида)

$\{x^k\}$**:**

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f^* = \min_{E_n} f(x),\ \text{если } U^* \neq \emptyset$$

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f^* = \inf_{E_n} f(x),\ \text{если } U^* = \emptyset$$

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

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

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

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

Примечание. Минимизирующая последовательность $\{x^k\}$ может и не сходится 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(минизирующих последовательностей)

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

$$\rho(x^k, x^*) \leq q\rho(x^{k-1}, x^*) \tag{7.3}$$

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

   Определение. Сходимость называется **сверхлинейной** если

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

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

   Определение. Квадратичная сходимость:

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

2. Критерии окончания итерационного процесса

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

   , где ε_i — заранее заданные точности

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

   , 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 минизации:

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

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:

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

повторять
  Вычисляем $\nabla f(x)$
  если Выполнено условие достижения точности $\|\nabla f(x)\| < \varepsilon$ **тогда**
    Вернуть $x^* := x$, $f^* := f(x^*)$
  конец если
  повторять
    Найти $y := x - \alpha \nabla f(x)$
    Вычислить $f(y)$
    если $f(y) < f(x)$ **тогда**
      $x := y$
      $f(x) := f(y)$
      Выйти из цикла
    иначе
      $\alpha := \frac{\alpha}{2}$
    конец если
  конец повторять
конец повторять

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

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

, 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

$$\|x^k - x^*\| = \|x^{k-1} - \alpha \nabla f(x^{k-1}) - x^*\| = \|x^{k-1} - x^* - \alpha A(x^{k-1} - x^*)\| =$$

$$= \|(E - \alpha A)(x^{k-1} - x^*)\|$$
$$\|x^k - x^*\| \le \|E - \alpha A\| \cdot \|x^{k-1} - x^*\| \le q\|x^{k-1} - x^*\| \le q^k\|x^0 - x^*\|$$

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

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

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 □

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

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

$$x^0 = (1,1)^T \quad \alpha = \alpha^* = \frac{2}{l + L}$$

Решение.

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

$$\alpha^* = \frac{2}{2+2} = \frac{1}{2}$$

$$x^1 = x^0 - \frac{1}{2}\, nabla f(x^0) = (0,0)^T$$

$$x^1 = x^*$$

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

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

Пример.

$$f(x) = x_1^2 + 100x_2^2 \to \min$$
$$x^0 = (1,1)^T$$
$$\alpha = \alpha^*$$

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

$$\Phi_k(\alpha) \to \min$$

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

Алгоритм 2 метод наискорейшего спуска

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

повторять
  Вычислить $\nabla f(x)$
  если $\|\nabla f(x)\| < \varepsilon$ **тогда**
    Вернуть $x^* := x$, $f^* := f(x)$
  конец если
  Решить задачу одномерной оптимизации 8.3 для $x^k := x$, т.е. найти α^*
  $x := x - \alpha^* \nabla f(x)$
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-орттгональных 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

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

, где p^k — A-ортогональные

Примечание. Если в итерационном процессе 14.8 на каждом жаге используется исчерпывающий спуск, то

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

Доказательство.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Для квадратичных функция:

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

Утвержение: 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

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

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

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

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

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. $\beta_{m \cdot N} = 0 \quad m = 1, 2, \dots$, где $m \cdot N$ — момент обновления метода(рестарта), часто полагают $N = n$ — размерность пространства E_n. Ретарт необходим для устранения накопленной погрешности метода, из-за которой вектора p^k перестанут указывать на направление убывания функции $f(x)$

Если функция хорошо апроксимируется квадратичной функции, 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 пострадют, 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 предсавить как:

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

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

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 пермешивания, элементы будут попадать в разные minibatch'и на каждой эпохе.

9.2.1 Adagrad (модификация)

Предлагается использовать разные η, для каждого minibatch'а.

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

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

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

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

Определим вспомогательный вектор:

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

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

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

, где e — коэффицент $\sim 1e-8$

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

, где $\odot$ — поэлементное умножение двух векторов

9.3 Метод покоординатного спуска

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

Алгоритм:

- Выбираем вектор $x_0 \in E_n$

$\forall i$:

1. фиксируем значение всех перменных, кроме x_i
2. $f(x_i) \to min$ 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 **разреженой**

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

Форматы хранения квадратных матриц:

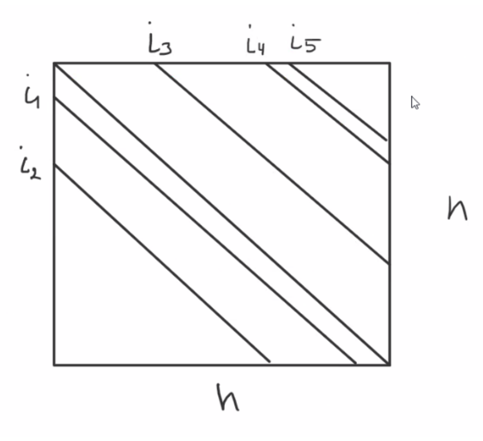
1. Диагональный
2. Ленточный
3. Профильный
4. Разреженый

Характеристики:

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

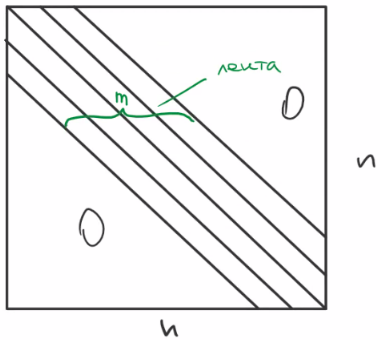
Будем называть ненулевыми элементами, те которые предполагается хранить в памяти.

10.1.1 Диагональный



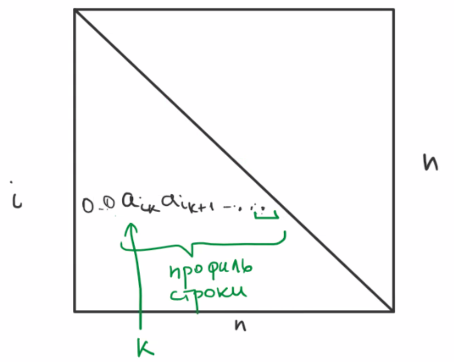
- $n \times n$, где n — размерноесть исходной матрицы, m — количество ненулевых диагоналей

10.1.2 Ленточный формат



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

10.1.3 Профильный формат



Обычно хранят несимметричный матрицы. Структуры хранения:

- Вещественный массив $di[n]$ — массив диагональных элементов
- Вещественные массивы al — элементы нижнего треугольника по строками, au — эленметы верхнего треугольника по столбцам
- Целочисленный массив $ia(k)$ =индекс(в нумерации с 1), с которого начинаются элементы k-ой строки(столбца) в массивах al, au. Размерноть равна $n+1$, при чем $ia[n+1]$ равен индексу первого незанятого элемента в al, au, $a[n+1]-1$ — размерность al и au.

Пример.

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

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

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

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

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

Для 6й строки: $al[ia[6]] = al[6] = a_{63}$, профиль 6й строки $ia[7] - ia[6] = 9 - 6 = 3$

1. $al[6] = a_{63}$
2. $al[7] = 0$

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 стобцам соответсвенно
3. Целочисленный массив ja — содержит номера столбцов (строк) хранимых внедиагональных элементов нижнего(верхнего) треугольника матрицы. $j \leq m$, где m — 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.

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

11.1.3 Обратный ход Гаусса

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

$$\vdots$$

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

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

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{i=k+1}^{n} a_{ki}^{(k-1)} x_i}{a_{kk}^{(k-1)}} \qquad k \in \overline{n,1}$$

$\sum_j^n = 0$, если $j > n$

Алгоритм 3 метод Гаусса

для $k = 1, \ldots, n-1$ **делать**
  для $i = k+1, \ldots, n$ **делать**
    $t_{ik} = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$
    $b_i = b_i - t_{ik} b_k$
    для $j = k+1, \ldots, n$ **делать**
      $a_{ij} = a_{ij} - t_{ik} a_{kj}$
    конец для
  конец для
конец для
$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$
для $k = n-1, \ldots, 1$ **делать**
  $x_k = \frac{(b_k - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj} x_j)}{a_{kk}}$
конец для

Модификация с постолбцовым выбором глваного элемента

Алгоритм 4 модификация алгоритма гаусса

$m:\ m \geq k,\ |a_{mk}| = \max_{i \geq k}\{|a_{ik}|\}$ $j = k, \ldots, n$ поменять местами b_x и b_m поменять местами a_{kj} и a_{mj}

Лекция 12

12.1 Прямые методы решения СЛАУ

Виды разложения матрицы A:

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

$$A = LU \tag{12.1}$$

$$LUx = b \quad y = Ux$$

$$Ly = b \tag{12.2}$$

1. $A \implies L$ и U
2. решить 12.2 — прямой ход: y
3. $Ux = y$ — обратный ход

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 & \dots \\ L_{21} & L_{22} & 0 & \dots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} U = \begin{bmatrix} 1 & U_{12} & U_{13} & \dots \\ 0 & 1 & U_{23} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \tag{12.3}$$

Красным помечено то, что мы находим на текущем шаге

- $A_{11} = L_{11}$
- $A_{21} = L_{21}$
- $A_{12} = L_{11} \cdot U_{12}$
- $A_{22} = L_{21} \cdot U_{12} + L_{22}$
- $A_{31} = L_{31}$
- $A_{32} = L_{31} \cdot U_{12} + L_{32}$

- $A_{13} = L_{11} \cdot U_{13}$
- $A_{23} = L_{21} \cdot U_{13} + L_{22} \cdot U_{23}$
- $A_{33} = L_{31} \cdot U_{13} + L_{32} \cdot U_{23} + L_{33}$

Алгоритм 5 Алгоритм разложения

$A_{11} = L_{11}$
для $i \leftarrow 2$ **до** n **делать**
  для $j \leftarrow 1$ **до** $i-1$ **делать**
    $L_{ij} = A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} \cdot U_{kj}$
    $U_{ji} = \frac{1}{L_{jj}} \left[A_{ji} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk} \cdot U_{ki}\right]$
  конец для
  $L_{ii} = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} \cdot U_{ki}$
конец для

12.1.1 Близкие к нулю главные элементы

ЭВМ: 5-разрядная арифметик с плавающей точки

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

$$6.001 \cdot 2.5 \cdot 10^{-3} = 1.50025 \cdot 10^4 \approx 1.5003 \cdot 10^4$$

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

$$-1.0 \cdot 10^{-3} \cdot x_2 + 6 \cdot 0.99993 = 6.0001 \implies x_2 = \frac{1.5 \cdot 10^{-3}}{-1.0 \cdot 10^{-3}} = -1.5$$

$$10 \cdot x_1 + (-7) \cdot (-1.5) = 7 \implies x_1 = -0.35$$

$$x = (-0.35, -1.50, 0.99993)$$

Хотя правильный ответ: $x^* = (0, -1, 1)$

12.1.2 Вектор ошибки и невязка

$$\begin{pmatrix} 0.780 & 0.563 \\ 0.457 & 0.330 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.217 \\ 0.127 \end{pmatrix}$$

ЭВМ: трехразрядная десятичная арифметика

$$\frac{0.457}{0.780} = 0.586$$

$$\begin{pmatrix} 0.780 & 0.563 \\ 0 & 0.0000820 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.217 \\ -0.000162 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = \frac{-0.00162}{0.0000820} = -1.98$$

$$x_1 = \frac{0.217 - 0.563 \cdot x_2}{0.780} = 1.71$$

$$x = (1.71, -1.98)^T$$

Определение. Невязка $\Gamma = b - Ax$. Если решение точное, то вектор невязки близок к 0

$$\Gamma = (-0.00206, -0.00107)^T$$

Точным решением является вектор $x^* = (1, -1)^T$
Величина ошибки решения: $\frac{\|x^* - x\|}{\|x^*\|}$

Определение. $\mathrm{cond}(A)$ — число обусловленности A. Отношение максимального и минимального собственного значения матрицы

Величина ошибки в решении приближенно равна величине решения $\times\ \mathrm{cond}(A) \times \varepsilon_{\text{маш.}}$
Пример. $\mathrm{cond}(A) = 10^6,\ \varepsilon = 10^{-8}$. В решении — 3 верных разряда

12.1.3 Векторные нормы

1. 2-норма (евклидова)

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

2. 1-норма (манхэтенское расстояние)

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

3. max-норма (∞-норма)

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$$

$$\|x\| > 0, \text{ если } x \neq 0 \ \|0\| = 0$$

$$\|cx\| = |c| \cdot \|x\| \ \forall c$$

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

$$Ax = b$$

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

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

$\frac{M}{m}$ — число обусловленности матрицы A

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

Будем считать, что Δb — ошибка в b, Δx — ошибка в x. Поскольку $A(\Delta x) = \Delta b$, то можно сказать, что:

$$\|Ax\| = \|b\| \leq M \cdot \|x\|$$

$$\|A\Delta x\| = \|\Delta b\| \geq m \cdot \|\Delta x\|$$

При $M \neq 0$

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

1. Свойства числа обусловленности

$$M \geq m$$

Свойство 1. $\text{cond}(A) \geq 1$
P — *матрица перестановок,* $\text{cond}(P) = 1$
$\text{cond}(I) = 1$

Свойство 2. $\text{cond}(c \cdot A) = \text{cond}(A)$

Свойство 3. D — *диагоняльная*

$$\text{cond}(D) = \frac{\max |d_{ii}|}{\min |d_{ii}|}$$

Пример. $D = \text{diag}(0.1),\ n = 100.\ \det D = 10^{-100}$ — малое число

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

Лекция 13

13.1 Число обусловленности

Пример.

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} 9.7 & 6.6 \\ 4.1 & 2.8 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 9.7 \\ 4.1 \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\|b\| = 13.8 \quad \|x\| = 1$$

$$\mathrm{cond}(A) = 2249.4$$

$$b' = \begin{pmatrix} 9.70 \\ 4.11 \end{pmatrix} \quad x' = \begin{pmatrix} 0.34 \\ 0.97 \end{pmatrix}$$

$$\Delta b = b - b' \quad \|\Delta b\| = 0.01$$

$$\Delta x = x - x' \quad \|\Delta x\| = 1.63$$

$$\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} = 0.00072464$$

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} = 1.63$$

13.1.1 Нормы и анализ ошибок

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

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$$

$$\tilde{x} : \|Ax\| = \|A\| \cdot \|\tilde{x}\|$$

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

$$\|a\| =_j \|a_j\|$$

Результат Уилкинсона

$$x^* : (A + E)x^* = b$$

, где элементы E имеют уровень ошибок округления

$$b - Ax^* = Ex^*$$

$$\|b - Ax^*\| = \|Ex^*\| \leq \|E\| \cdot \|x^*\|$$

$$\frac{\|b - Ax^*\|}{\|A\| \cdot \|x^*\|} \leq C \cdot \varepsilon_{\text{маш.}}$$

Если A не вырождена то: $x - x^* = A^{-1} \cdot (b - Ax^*)$

$$\|x - x^*\| \leq \left\|A^{-1}\right\| \cdot \|E\| \cdot \|x^*\|$$

$$\frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|} \leq C \cdot \|A\| \cdot \left\|A^{-1}\right\| \cdot \varepsilon_{\text{маш.}}$$

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

$$\left\|A^{-1}\right\| = \frac{1}{m} \quad \frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|} \leq C \cdot \operatorname{cond}(A) \cdot \varepsilon_{\text{маш.}}$$

- a_j — столбцы A
- $\tilde{a}_j$ — столбцы A^{-1}

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

13.1.2 Оценивание числа обусловленности

$$\operatorname{cond}(A) = \frac{\max \frac{\|Ax\|}{\|x\|}}{\min \frac{\|Ax\|}{\|x\|}}$$

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

1-норма:

- a_j — столбец

$$\|A\| = \max_j \|a_j\|$$

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

$$y \coloneqq Ax \quad Az = y$$

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

Цель — подобрать y. $A^T y = c$, где c — вектор с компонентами ± 1

Пример.

$$A = \begin{pmatrix} 9.7 & 6.6 \\ 4.1 & 2.8 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.4227 & 1 \end{pmatrix}}_{L} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 9.7000 & 6.6000 \\ 0 & 0.0103 \end{pmatrix}}_{U}$$

$y : A^T y = c \implies U^T(L^T y) = c$
$c_1 = 1; c_2 = ?$

$$(L^T y)_1 = \frac{c_1}{U_{11}} = \frac{1}{9.7} = 0.1031$$

$$(L^T y)_2 = \frac{c_2 - U_{21}(L^T y)_1}{U_{22}} = \frac{\pm 1 - 6.6 \cdot 0.10031}{0.0103}$$

$(L^T y)_2$ большее, если $c_2 = -1$, значит

$$(L^T y) = (0.1031, -163)^T \quad y = (-163, 69)^T$$

$$Az = y \implies z = (12690, -18640)^T$$

$$\|A^{-1}\| \approx \frac{\|z\|}{\|y\|} = \frac{|12690| + |-18640|}{|-163| + |69|} = \frac{31330}{232} = 135.04$$

$$\|A\| = 13.8 \quad \operatorname{cond}(A) \approx 13.8 \cdot 135.04 = 1863.6$$

13.2 Дополнительно о градиентных методах

$\{x_k\}$: $x^k = x^{k-1} + \alpha_k u^k \quad k \in \mathbb{N}$
$u^k \in E_n$. $(\nabla f(x), u) < 0$ — условие спуска
Как находить α_k

$$f(x^{k-1} + \alpha_k u^k) \leq (1 - \lambda_k) f(x^{k-1}) + \lambda_k \min_{\alpha \in E} f(x^{k-1} + \alpha u^k) \quad \lambda_k \in [0, 1]$$

$$f(x^{k-1} + \alpha_k u^k) \leq f(x^{k-1}) \tag{13.1}$$

— если это выполнено, то $\{x^k\}$ — релаксационная $\lambda_k = 0$, тогда 13.1, если же $\lambda_k = 1$, то для нахождения α_k^* решаем задачу одномерной оптимизации. Для случая $\lambda_k \in (0, 1)$:

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

$$\omega(x) = -\nabla f(x)$$

13.2.1 Градиентный спуск

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

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

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

В окрестности точки $\tilde{x}$, может быть $f(x^k) > f(x^{k-1})$

Теорема 13.2.1. Пусть $f(x)$ ограничена снизу и дифференцируема в E_n, а ее градиент удовлетворяет условию Липшица, т.е. $\forall x, y \in E_n$

$$|\nabla f(x) - \nabla f(y)| \leq L|x - y|$$

$L > 0$ — константа. Тогда $\{x^k\}$, определяемое рекурентным соотношением

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

с $\alpha \in (0, \frac{2}{L})$ является релаксационной. При этом справедлива оценка

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

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

Если $f(x)$ удовлетворяет теореме, то при $\alpha = \frac{1}{L}$, $\{x^k\}$ — релаксационная последовательность и не происходит “проскакивания“ стационарной точки

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

$\tilde{x}$ — стационарная точка $\implies \nabla f(\tilde{x}) = 0$
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 $\{x^k\}$, при $\gamma_0 > 0$:

$$f(x^{k-1}) - f(x^k) \geq \gamma_0|\omega^k|^2 \quad k = \overline{1, m} \tag{13.2}$$

$$f(x^0) - f(x^m) \geq \gamma_0 \sum_{k=1}^{m} |\nabla f(x^{k-1})|^2$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} |\nabla f(x^{k-1})|^2$$

— знакоположительный ряд, т.е. $\nabla f(x^k) \xrightarrow[k \to \infty]{} 0$

13.2.2 Модификация

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k\omega^k \quad k \in \mathbb{N}$$

$\alpha_k > 0$

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

$$\varphi'_k(0) = (\nabla f(x), \omega^k) = -|\omega^k|^2 < 0$$

φ_k — убывает в окрестности $\alpha = 0$ до $\tilde{\alpha}_k$. $\alpha_k = \alpha_k^*$ — исчерпывающий спуск. Если $f(x)$ удовлетворяет теореме, то $\{x^k\}$ по исчерпывающему спуску удовлетворяет условиям 13.2:

$$\varphi'_k(\alpha) = (\nabla f(x^{k-1} + \alpha\omega^k), \omega^k)$$

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

$$(\omega^{k+1}, \omega^k) = (-\nabla f(x^k), \omega^k) = -\varphi_k'(\alpha_k^*) = 0$$

$$\left\|\omega^k\right\|^2 = (\omega^k, \omega^k - \omega^{k+1}) \leq |\omega^k| \cdot |\omega^k - \omega^{k+1}| =$$

$$= |\omega^k| \cdot |\nabla f(x^{k-1}) - \nabla f(x^k)| \leq L|\omega^k| \cdot |x^{k-1} - x^k| = L \cdot \alpha_k^* |\omega^k|^2$$

$\alpha_k^* \geq \frac{1}{L}$:

$$f(x^{k-1}) - f(x^k) \geq f(x^{k-1}) - f(\tilde{x}^k) \geq \frac{1}{2L}|\omega^k|^2$$

$$\tilde{x}^k = x^{k-1} + \underbrace{\frac{1}{L}}_{\alpha} \omega^k$$

Лекция 14

14.1 Минимизация квадратичной функции

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

- A — симметричная матрица
- $A = H$ — матрица Гессе $f(x)$

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

Если A невырождена, то $f(x)$ в силу необходимого условия экстремума имеет единственную стационарную точку $x^* = -A^{-1}b$. x^* будет точкой наименьшего значения $f(x)$ тогда и только тогда, когда квадратичная форма $\langle Ax, x\rangle$ положительно определена

Пусть $x^* = 0$, то есть минимум квадратичной функции в начале координат(вектор $b = 0$), тогда будем рассматривать

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle \quad x \in E_n \tag{14.1}$$

A — положительно определена. Тогда квадратичная функция $\frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$ неотрицательная в E_n и достигает наименьшего значения 0 в единственной точке $x^* = 0$

Рассмотрим метод градиентного спуска. Для $f(x)$ из 14.1 $\nabla f(x) = Ax$ в точке x. Пусть $x^0 \neq 0$, тогда $w^1 = -\nabla f(x^0) = -Ax^0$

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

$$x^1 = x^0 + \alpha_1 w^1 - x^0 - \alpha_1 Ax^0 = (I - \alpha_1 A)x^0 \tag{14.2}$$

Из 14.2 следует:

- точку минимума квадратичной функции можно достичь за одну итерацию, если x^0 — собственный вектор матрицы $A \implies$ если x^0 — собственный вектор матрицы A, а λ_j — его собственное значение, то

$$Ax^0 = \lambda_j x^0 \text{ и } (A - \lambda_j I)x^0 = 0$$

Если $\alpha_1 - \frac{1}{\lambda_j}$

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

тогда x^1 совпадает с точкой минимума $x^* = 0$
В 2-мерном случае $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$ — 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: радиус-вектор точки является собственным вектором матрицы A.

- **Частный случай** $A = \lambda I$ — все собственные значения A совпадают, а каждый ненулевой вектор $x \in E_n$ является собственным. Тогда минимум функции $f(x)$ 14.1 достигается за одну итерацию при любом выборе x^0

Квадратичную форму 14.1 невырожденной заменой переменных можно привести к каноническому виду с единичной матрицей. Применим ортогональное преобразование к квадратичной форме, тогда

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

, $\xi = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$, λ_j — положительные собственные значения A $(j = \overline{1, n})$
Изменим масштабы переменных, введем замену

$$\eta_j = \sqrt{\lambda_j}\xi_j \quad j = \overline{1, n}$$

тогда

$$f_2(\eta) = \sum_{j=1}^{n} \eta_j^2 \quad \eta = (\eta_1, ; \eta_n)$$

В новых переменных $\eta_1, \ldots, \eta_n$ минимум квадратичной функции методом градиентного спуска достигается за одну итерацию при любом выборе начальной точки x^0

- Недостаток — трудоемкие вычисления, сложности решения задачи на собственные значения A
- Преимущества — полезен метод, когда функция имеет овражный характер

Рассмотрим метод градиентного спуска с $\alpha_k = \alpha = const$ на всех итерациях
На k-й итерации

$$x^k = x^{k-1} +^k = x^{k-1} - \alpha A x^{k-1} = (I - \alpha A)x^{k-1} \tag{14.3}$$

Заключение о сходимости $\{x^k\}$ можно сделать на основе теоремы о неподвижной точке. Согласно теореме $\{x^k\}$ сходится к неподвижной точке x^* отображения $f(x)$, если это отображение является **сжимающим**, то есть подчиняется условию Липшица

$$|f(x) - f(y)| \leq g|x - y| \quad g = const < 1 \tag{14.4}$$

В 14.3 отображение — линейный оператор, который является сжимающим отображением, если имеет норму, меньше единицы. Норма = спектральная норма (для симметричной матрицы) = $|\lambda_{\max|}$
В итоге для сходимости $\{x^k\}$:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha w^k \quad \alpha > 0$$

согласно 14.3 и теореме о неподвижной точке достаточно выполнения

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

Для квадратичной функции с положительно определенной матрицей A с собственными значениями $0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n$ матрицы $I - \lambda A$ имеет собственные значения $1 - \alpha\lambda j$, $j = \overline{1, n}$:

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

Тогда условие

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

равносильно

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

из теоремы о неподвижной точке следует, что для $\{x^k\}$ верна оценка $|x^k - x^*| \le g^k |x^0 - x^*|$, g — постоянная Липшица (из 14.4)
Для ускорения сходимости $\{x^k\}$ g должно быть как можно меньше. В рассматриваемом случае $g(\alpha) = \min$, когда собственные значения $1 - \alpha\lambda_n$ и $1 - \alpha\lambda_1$ матрицы $I - \alpha A$ совпадает по абсолютной величине и противоположны по знаку

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

, откуда оптимальное α:

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

Выбирая $\alpha = \alpha^*$

$$g^* = g(\alpha^*) = \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1} = \frac{\operatorname{cond}(A) - 1}{\operatorname{cond}(A) + 1} \tag{14.5}$$

$\operatorname{cond}(A) = \frac{\lambda_n}{\lambda_1}$
$\operatorname{cond}(A) \gg 1$ — овражная структура, $\{x^k\}$ сходится медленно

- Если $A = I$, то все собственные значения $= 1$, поэтому $\operatorname{cond}(A) = 1$ и $g^* = 0$, тогда минимум достигается за одну итерацию при любом выборе x^0
- Если $\alpha \notin \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$, $\{x^k\}$ не релаксационная, а метод расходится или зацикливается

14.1.1 Минимизация с использованием исчерпывающего спуска

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

происходит с нарушением условия $\alpha_k \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$ Исчерпывающий спуск на k-й итерации: поиск стационарной точки $\varphi_k(\alpha) = f(x^{k-1} + \alpha w^k)$

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

— функция с положительным коэффициентом при старшей степени, поэтому они имеют единственную стационарную точку

$$\alpha_k = -\frac{\langle Ax^{k-1}, w^k\rangle}{\langle Aw^k, w^k\rangle} = \frac{|w^k|^2}{\langle Aw^k, w^k\rangle} \tag{14.6}$$

Из 14.6:

- $\alpha_k = \frac{1}{\lambda_n}$, 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

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n \quad \frac{1}{\lambda_1} > \frac{1}{\lambda_2} > \dots > \frac{1}{\lambda_n}$$

Если $\operatorname{cond}(A) = \frac{\lambda_n}{\lambda_1} > 2$, то $\alpha_k \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$ нарушается при $\alpha_k = \frac{1}{\lambda_1}$
При $\alpha = const$ шаг определяется без учета скорости убывания функции. В случае наискорейшего спуска шаг спуска тем больше, чем медленнее функция убывает

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

14.1.2 Метод сопряженных направлений

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \quad k \in \mathbb{N} \tag{14.7}$$

α_k — шаг, p^k — вектор спуска $\in E_n$ (может быть не единичным)
Рассмотрим квадратичную функцию (частный случай) $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$, A — положительно определенная матрица. $f(x)$ можно привести к каноническому виду

$$f_2(\eta) = \sum_{j=1}^{n} (\eta)_j^2 \quad \eta = (\eta_1, \dots, \eta_n) \tag{14.8}$$

в переменных η метод градиентного спуска сходится за одну итерацию. Минус такого подхода — вычисление градиента к координатах η, приведение к каноническому виду затратная операция
Необходим другой подход: Линейная невырожденная замена переменных в квадратичной форму $\sim$ переход в E_n от одного базиса к другому. Тогда приведение к каноническому виду $=$ выбор базиса в E_n. Если A симметричная, положительно определенная матрица, то $\langle x, y\rangle_A = \langle Ax, y\rangle$ — скалярное произведение в E_n, $\langle Ax, x\rangle$ — квадрат евклидовой нормы вектора x в евклидовом пространстве с указанным скалярным произведением. Приведение квадратичной формы к каноническому виду $=$ выбор ортонормированного базиса в евклидовом пространстве со скалярным произведением $\langle x, y\rangle_A$
Плюсы подхода

- позволяет упростить вид квадратичной формы
- вместо решения задачи на собственные значения можно использовать процедуру построение ортогонального базиса (процесс ортогонализации)

1. Условие ортогональности
$$p^1 \neq 0 \quad p^2 \neq 0$$
относительно скалярного произведения $\langle x, y\rangle_A$ имеет вид
$$\left\langle Ap^1, p^2\right\rangle = 0$$
Такие вектора называются сопряженными относительно положительно определенной матрицы A, или A-ортогональными. Направления, определяемые p^1 и p^2, сопряженные направления.
Рассмотрим A-ортогональный базис $p^j,\ j = \overline{1, n}$. В этом базисе $f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle$ имеет канонический вид
$$f_1(\xi) = \lambda_1\xi_1^2 + \cdots + \lambda_n\xi_n^2 \quad \xi = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$$
, $\lambda_j > 0,\ j = \overline{1, n}$ — определяются нормами $\left\|p^j\right\|_A$ с введенным скалярным произведением
$$\lambda_j = \frac{1}{2}\left\|p^j\right\|_A^2$$
Примечание. $f_1(\xi)$ — половина квадрата нормы вектора $(\xi_1, \ldots, \xi_n)$. Если $p^j = 0, 0, \ldots, \underset{j}{1}, \ldots, 0$ $\Longrightarrow$
$$\lambda_j = \frac{1}{2}\left\|p^j\right\|_A^2$$
Функция $f_1(\xi)$ — сепарабельна:

- исчерпывающий спуск в направлении p^j = минимизация одного из слагаемых такой функции
- последовательность из n исчерпывающих спусков в направлении $p^1, \ldots, p^n$ все слагаемые $\Longrightarrow$ в точку минимума

Выберем x^0, исчерпывающий спуск для квадратичной функции $f(x)$ в направлении p^1 = исчерпывающий спуск для $f_1(\xi)$ в направлении первого базисного вектора и приведет к обнулению первой координаты точки x^0 в базисе $p^1, \ldots, p^n$. Следовательно $x^1 = x^0 - \xi_1^0 p^1$, где ξ_1^0 — первая координата x^0 в ортогональном базисе p^j:
$$\xi_1^0 = \frac{\left\langle Ax^0, p^1\right\rangle}{\left\langle Ap^1, p^1\right\rangle}$$
Сравним $x^1 = x^0 - \xi_1^0 p^1$ и $x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$. Повторим схему для всех p^j

Теорема 14.1.1. 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 14.7, вычисляются по формуле исчерпывающего спуска
$$\alpha_k = -\frac{\left\langle Ax^{k-1}, p^k\right\rangle}{\left\langle Ap^k, p^k\right\rangle} \quad k = \overline{1, n} \tag{14.9}$$
Примечание. Если p^j и $-p^j$ в точке x^{k-1} не определяют направление спуска, то $\left\langle Ax^{j-1}, p_j\right\rangle = 0$, значит $\alpha_j = 0 \implies$ спуск в направлении p^j не производится, количество итераций $< n$

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

$$x^0 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\left\langle Ax^0, p^i \right\rangle}{\left\langle Ap^i, p^i \right\rangle} p^i \tag{14.10}$$

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

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

$$x^* = x^0 - \sum_{i=1}^{n} \frac{\left\langle \nabla f(x^0), p^i \right\rangle}{\left\langle Ap^i, p^i \right\rangle} p^i \tag{14.11}$$

Примечание.

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

Тогда 14.10 примет вид:

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

— верно для любого x^0, значит линейный оператор в E_n с матрицей

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

является тождественным и

$$A^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{p^i (p^i)^T}{\left\langle Ap^i, p^i \right\rangle} \tag{14.12}$$

таким образом система векторов $p^1, \ldots, p^n$ сопряженных относительно положительно определенной матрицы A, позволяет построить A^{-1}. Тогда 14.11 перепишем в виде

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

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

Для квадратичной функции $f(x)$ выполнение n итераций исчерпывающего спуска $\sim$ одному спуску вида

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

Примечание. Использование векторов p^j — основа метода сопряженных направлений

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

2. Рассмотрим минимизацию

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

- можно использовать любой базис, проводя процесс ортогонализации относительно скалярного произведения $\langle x, y \rangle_A$
- более эффективно исходить их системы антиградиентов, тем самым объединяя в процессе спуска процесс ортогонализации

Выберем $x^0 \in E_n$:

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

$p^1 = w^1$, если $|p^1| \neq 0$, то p^1 — направление спуска, иначе $x^0 = x^*$
Проводим исчерпывающий спуск в направлении $p^1 = w^1$ (по формуле 14.6)

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

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

Вторая итерация:

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

если $|w^2| = 0, x^1 = x^*$, иначе проводим ортогонализацию p^1 и w^2 относительно скалярного произведения $\langle x, y \rangle_A$:

$$p^2 = w^2 - \frac{\left\langle Ap^1, w^2 \right\rangle}{\langle Ap^1, p^1 \rangle} p^1 \tag{14.13}$$

$\left\langle w^2, p^1 \right\rangle = 0$ поскольку w^2 и p^1 — антиградиенты на двух последовательных итерация исчерпывающего спуска, а значит w^2 и p^1 — линейно независимы, а $|p^2| \neq 0$
Вектор p^2 — направление спуска из x^1, учитывая ортогональность w^2 и p^1:

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

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

Продолжим процесс исчерпывающего спуска вдоль очередного направления, полученного корректировкой антиградиента в текущей точке, получим n сопряженных направлений спусков и достигнем точки минимума через n итераций (или раньше)

3. Уточнения

   (a) каждый w^k ортогонален не только предпоследнему направлению спуска p^{k-1}, но и всем $p^i, i = \overline{1, k-2}$

   $$w^j = -Ax^{j-1} - b \implies w^k - x^{k-1} = -A(x^{k-1} - x^{k-2}) = -\alpha_{k-1} Ap^{k-1}$$

   при $k - 1 > j$:

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

   следовательно

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

   Вывод: w^k и w^i, $k > i$ — ортогональны, т.к. w^i — линейная комбинация $p^1, \ldots, p^n$, ортогональных w^k

(b) антиградиент w^k сопряжен со всеми p^i, $i < k-1$:

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

Из 1, 2 следует, что процесс ортогонализации

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

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

Примечание. главный плюс при использовании в процессе ортогонализации последовательности антиградиентов

4. Общая схема для $k = 1$: x^0

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

для $k > 1$:

$$\begin{cases} w^k = -Ax^{k-1} - b \\ p^k = w^k - \frac{\left\langle Ap^{k-1}, w^k \right\rangle}{\left\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \right\rangle} p^{k-1} \\ x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \end{cases} \tag{14.14}$$

α_k — определять из условия исчерпывающего спуска, например

$$\alpha_k = \frac{\left\langle w^k, p^k \right\rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle} \tag{14.15}$$

На каждой итерации выполняются

$$\left\langle w^k, w^i \right\rangle = 0 \quad k \neq i$$
$$\left\langle w^k, p^i \right\rangle = 0 \quad k > i$$
$$\left\langle Ap^k, p^i \right\rangle = 0 \quad k \neq i$$

Метод сопряженных направлений можно использовать для неквадратичной функции: в 14.14 A заменить матрицей Гессе $f(x)$, тогда получим: При $k = 1$: x_0

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

При $k > 1$:

$$\begin{cases} w^k = -\nabla f(x^{k-1}) \\ p^k = w^k + \beta_k p^{k-1} \\ x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \end{cases} \tag{14.16}$$

$$\beta_k = -\frac{\left\langle H_k p^{k-1}, w^k \right\rangle}{\langle H_k p^{k-1}, p^{k-1} \rangle} \tag{14.17}$$

, H — матрица Гессе, α_k — из условия исчерпывающего спуска (например из 14.15)

14.1.3 Модификации

Для квадратичной функции — без использования A

1. Метод сопряженных градиентов $w^{k-1} - w^k = \alpha_{k-1} A p^k \quad k > 1$

$$\left\langle Ap^{k-1}, w^k \right\rangle = \frac{\left\langle w^{k-1} - w^k, w^k \right\rangle}{\alpha_{k-1}} = -\frac{|w^k|^2}{\alpha_{k-1}} \tag{14.18}$$

$$\left\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \right\rangle = \frac{\left\langle w^{k-1} - w^k, p^{k-1} \right\rangle}{\alpha_{k-1}} = \frac{\left\langle w^{k-1}, p^{k-1} \right\rangle}{\alpha_{k-1}} \tag{14.19}$$

   Выполнив замену в 14.14, получим 14.16, где

$$\beta_k = \frac{|w^k|^2}{\langle w^{k-1}, p^{k-1} \rangle} \quad k = 2, \ldots \tag{14.20}$$

2. Метод Флетчера-Ривса

$$p^{k-1} = w^{k-1} + \beta_k p^{k-1}$$

   p^{k-1} и p^{k-2} ортогональны $\implies$

$$\left\langle p^{k-1}, w^{k-1} \right\rangle = |w^{k-1}|^2 + \beta_k \left\langle p^{k-2}, w^{k-1} \right\rangle = |w^{k-1}|^2 \implies$$

$$\implies \beta_k = \frac{|w^k|^2}{|w^{k-1}|^2} \quad k = 2, \ldots \tag{14.21}$$

3. Метод Полака-Рибьера w^k и w^{k-1} — ортогональны

$$|w^k|^2 = \left\langle w^k - w^{k-1}, w^k \right\rangle \implies$$

$$\implies \beta_k = \frac{\left\langle w^k - w^{k-1}, w^k \right\rangle}{|w^{k-1}|^2} \quad k = 2, \ldots \tag{14.22}$$

14.1.4 Выводы

14.20-14.22 эквивалентны для квадратичных функций, для неквадратичных приводят к разным итерационным процессам. Для неквадратичных функций точку минимума не удается найти за конечное число шагов, а процесс может оказаться расходящимся или зацикливающимся.
α_k в общем случае находится численно, решая задачу одномерной минимизации $\implies$ погрешность на каждой итерации, что снижает скорость сходимости или приводит к расходимости
Чтобы снизить влияние погрешности используют ‘обновление‘ алгоритма:

1. $\beta_k = 0$ через заданное число итераций (моменты рестарта кратные n). Это позволяет избежать накопления вычислительных погрешностей и уменьшить вероятность построения после каждых n итераций линейно зависимых направлений спуска, но приводит к росту общего числа итераций

2. На практике метод работает $\leq n$ итераций, рестарт может не вызваться ни разу. Альтернативный вариант рестарта — условие Пауэлла:

$$|\left\langle \nabla f(x^k), \nabla f(x^{k+1}) \right\rangle| \geq v \left\| \nabla f(x^{k+1}) \right\|^2$$

   — оптимально выбрать $v = 0.1$

Метод Флетчера-Ривса без рестартов является менее эффективным. Наиболее популярным является метод Полака-Рибьера

Примечание. **Линейный метод Флетчера-Ривса**

- в начальной точке x^0:
$$w^1 = -\nabla f(x^0) \quad p^1 = w^1$$
- $k > 1$, α_k — линейный поиск
$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$$
$$\beta_k = \frac{|w^k|^2}{|w^{k-1}|^2}$$
$$p^k = w^k + \beta_k p^{k-1}$$

В общем случае метод Флетчера-Ривса не гарантирует того, что p^k — направление спуска

- существует доказательство того, что если в линейном поиске (одномерная минимизация) используется сильные условия Вульфа с $c_2 < \frac{1}{2}$, то p^k будет направлением спуска (то есть поиск должен быть точнее)
- Сильное условие Вульфа:
$$\Phi_k(\alpha) \leq \Phi_k(0) + c_1\alpha\Phi_k'(0)$$
$$|\Phi_k'(\alpha)| \leq c_2|\Phi_k'(0)|$$
используются квадратичные/кубические аппроксимации

Лекция 15

15.1 Метод Ньютона

Если целевая функция дважды дифференцируема в пространстве E_n в процессе поиска можно использовать не только информации о градиенте, но и матрице Гесса. Для оптимизируемой функции $f(x) \in E_n$ разложение по формуле Тейлора:

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

$$\varphi_k(x) = f(x^{k-1}) + (\nabla f(x^{k-1}), x - x^{k-1}) + \frac{1}{2}(H(x^{k-1})(x - x^{k-1}), x - x^{k-1})$$

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

$$\left[\ \nabla(a^T x) = a; \quad \nabla(x^T A x) = 2Ax\ \right]$$

$$x^k = x^{k-1} - H^{-1}(x^{k-1})\nabla f(x^{k-1}) \quad k \in \mathbb{N} \tag{15.1}$$

$\tilde{x}^k$ — вспомогательная точка для построения релаксационной последовательности $\{x^k\}$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k(\tilde{x}^k - x^{k-1}) = x^{k-1} + \alpha_k p^k \quad \alpha_k > 0 \tag{15.2}$$

$p^k = \tilde{x}^k - x^{k-1}$ — направление спуска

$$p^k = -H^{-1}(x^{k-1})\nabla f(x^{k-1}) \tag{15.3}$$

$$(\nabla f(x^{k-1}), p^k) = -(\nabla f(x^{k-1}), H^{-1}(x^{k-1})\nabla f(x^{k-1})) < 0$$

H — положительно определена $\implies$ H^{-1} — положительно определена Выбор $\alpha_k \to$

1. $\varphi_k(\alpha) = f(x^{k-1} + \alpha p^k) \to \min$
2. исчерпывающий спуск по p^k
3. дробление α_k

$f(x)$ — квадратичная функция с положительно определенной матрицей A. x^0 — p^k — ньютоновское направление $\implies$ точка минимума за одну итерацию

$$f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x); \quad A = H$$

$$p^1 = -A^{-1}\nabla f(x^0) = -A^{-1}(Ax^0 + b) = -x^0 - A^{-1}b$$

$$x^1 = x^0 + p^1 = -A^{-1}b$$

15.1.1 Сходимость метода Ньютона

- Зависит от x^0. Если $f(x)$ сильно выпуклая и $\forall x, y \in E_n$

  $$H(x): \ \|H(x) - H(y)\| \leq L|x - y| \quad L > 0$$

  и удачный выбор x^0 (x^0 близок к x^*), то метод Ньютона при $\alpha_k = 1$ в 15.2 обладает квадратичной сходимости

  $$|x^k - x^*| \leq C|x^{k-1} - x^*|^2 \quad C = const$$

  Если $f(x)$ не является сильно выпуклой или начальное приближение x^0 далеко от x^* $\implies$ метод Ньютона может расходиться

Алгоритм 6 Метод Ньютона

повторять
  Вычислить $\nabla f(x)$
  $H = \nabla^2 f(x)$
  Решить СЛАУ: $Hp^k = -\nabla f(x)$
  $x^k = x^{k-1} + p^k$
до тех пор пока $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ($\|p^k\| < \varepsilon$)
$x^* = x^k$

15.1.2 Метод Ньютона с одномерным поиском

$x^k \to$ одномерный поиск в направлении p^k

$$\alpha_k = \min_{\alpha} f(x^k + \alpha p^k) \tag{15.4}$$

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

Пока $\|x^k - x^{k-1}\| \geq \varepsilon$ — итерации продолжать

Алгоритм 7 Метод Ньютона с одномерным поиском

повторять
  Вычислить $\nabla f(x)$
  $H = \nabla^2 f(x)$
  Решить СЛАУ: $Hp^k = -\nabla f(x)$
  $\alpha_k = \min_\alpha f(x^{k-1} + \alpha p^k)$
  $x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$
до тех пор пока $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ ($\|p^k\| < \varepsilon$)
$x^* = x^k$

Метод надежнее обычного метода Ньютона, но его эффективность существенно зависит от того, является ли p^k направлением спуска

15.1.3 Метод Ньютона с направлением спуска

Если p^k — направление спуска: $(p^k)^T\nabla f(x^k) < 0$. Если $(p^k)^T\nabla f(x^k) > 0$, то p^k — не является направлением спуска, в этом случае использовать антиградиент $-\nabla f(x^k)$.

$$H(x^k)p^k = -\nabla f(x^k) \implies p^k = \begin{cases} p^k & (p^k)^T\nabla f(x^k) < 0 \\ -\nabla f(x^k) & (p^k)^T\nabla f(x^k) > 0 \end{cases} \tag{15.5}$$

$$x^1 = x^0 + \alpha_0 p^0 \quad p^0 = -\nabla f(x^0) \quad \alpha_0 = \min_{\alpha} f(x^0 + \alpha p^0) \tag{15.6}$$

$(k > 1)$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \quad \alpha_k = \min_{\alpha} f(x^{k-1} + \alpha p^{k-1}) \tag{15.7}$$

$$\left\|x^k - x^{k-1}\right\| > \varepsilon$$

Алгоритм 8 Метод Ньютона с направлением спуска

повторять
  Вычислить $\nabla f(x)$
  $H = \nabla^2 f(x)$
  Решить СЛАУ: $Hp^k = -\nabla f(x)$
  если $(p^k)^T\nabla f(x^k) > 0$ **тогда**
    $p^k = -\nabla f(x^k)$
  конец если
  $\alpha_k = \min_\alpha f(x^{k-1} + \alpha p^k)$
  $x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$
до тех пор пока $\left\|x^k - x^{k-1}\right\| < \varepsilon$ $(\left\|p^k\right\| < \varepsilon)$
$x^* = x^k$

15.1.4 Метод Ньютона с дроблением шага

$$f(x^{k-1}) - f(x^k) \geq -\omega\alpha_k(\nabla f(x^{k-1}), p^k) \quad \omega \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \tag{15.8}$$

Начальное $\alpha_k = 1 \implies$ проверим условие 15.8, если нарушено, то α_k — корректировка, $\alpha_k^*\nu$, ν — коэффициент,снова проверка ..., $\nu \in (0, 1)$

Алгоритм 9 Метод Ньютона с дроблением шага

Ввод $\nu \in (0, 1)$
  повторять
    Вычислить $\nabla f(x)$
    $H = \nabla^2 f(x)$
    Решить СЛАУ: $Hp^k = -\nabla f(x)$
    если $(p^k)^T \nabla f(x^k) > 0$ **тогда**
      $p^k = -\nabla f(x^k)$
    конец если
    $\alpha_k = \min_\alpha f(x^{k-1} + \alpha p^k)$
    пока $f(x^{k-1}) - f(x^k) < -\omega \alpha_k (\nabla f(x^{k-1}), p^k)$ **делать**
      $\alpha_k = \alpha_k \cdot \nu$
    конец пока
    $x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$
  до тех пор пока $\|x^k - x^{k-1}\| < \varepsilon$ $(\|p^k\| < \varepsilon)$
  $x^* = x^k$

15.1.5 О сходимости

Квадратичная сходимость: $|x^k - x^*| \leq L|x^{k-1} - x^*|^2$

1. $x^0 \quad H(x^0), H^{-1}$

$$p^k = -H^{-1}(x_0)\nabla f(x^{k-1}) \tag{15.9}$$

   Если $H(x^0)$ не является положительно определенной, то в 15.9

$$\tilde{H}^1 = \tau_1 I + H(x^0)$$

   , $\tau_1 \implies \tilde{H}^1$ — положительно определенная. Этот подход дает линейную скорость сходимости $|x_k - x^*| \leq q|x^{k-1} - x^*|$, $q > 0$

2. H — обновляется через фиксированное количество итераций

   $m \;\; H^{-1}(x^0)$

   $2m \;\; H^{-1}(x^m)$

   Этот подход имеет сверхлинейную скорость сходимости: $|x^{km} - x^*| \leq C|x^{(k-1)m} - x^*|^{m+1}$, $C > 0$

15.2 Метод Марквардта

Комбинация методов наискорейшего спуска и метода Ньютона

1. движение из x^0 в направлении $\nabla f(x)$ приводит к существенному уменьшению $f(x)$
2. направление эффективного поиска в окрестности точки x^* определяется по методу Ньютона

15.2.1 Идея метода

$$(H(x) + \tau I)\, p^k = -\nabla f(x) \tag{15.10}$$

, где τ — скалярный параметр, I — единичная матрица

При большом τ в 15.10 матрицей $H(x)$ можно пренебречь, тогда получим $\tau I p^k = -\nabla f(x)$, то есть $p^k = \frac{-\nabla f(x)}{\tau}$ — совпадает с направлением антиградиента — направлением наискорейшего спуска

При $\tau \to 0$ в 15.10 можно пренебречь τI, тогда $H(x)p^k = -\nabla f(x)$ — метод Ньютона

При промежуточном τ направление p^k лежит между направлением антиградиента и направлением метода Ньютона

15.2.2 Реализация

Выбираем $\tau \gg 1$. В процессе поиска $\tau_k = \tau_{k-1} \cdot \beta$, $\beta \in (0, 1)$. В этом случае на начальных шагах выполняются итерации по методу наискорейшего спуска, а на конечных — по методу Ньютона

$$x^k = x^{k-1} + p^k$$
$$\left(H(x^{k-1}) + \tau_{k-1} I\right) p^k = -\nabla f(x^{k-1}) \tag{15.11}$$
$$\tau_k = \tau_{k-1} \cdot \beta$$

$\left\|x^k - x^{k-1}\right\| < \varepsilon$ —условие останова
τ_k — позволяет изменять направление поиска и регулировать длину шага. Если шаг слишком большой и $f(x^{k+1}) > f(x^k)$, то $\tau_k = \frac{\tau_k}{\beta}$ и вновь применяют 15.11, но уже с меньшим p^k
Метод Марквардта позволяет устранить недостаток метода Ньютона, связанный с возможной плохой обусловленностью СЛАУ:

- для $I \implies \text{cond}(I) = 1$
- для $H \implies \text{cond}(H) \geq 1$

В общем случае H может быть вырожденной $\implies$ СЛАУ 15.3 не имеет решения, однако СЛАУ 15.11 лишена этого недостатка
В точках, далеких от минимума, H является, как правило, плохо обусловленной, но в этих точках $\tau \gg 1$, поэтому

$$H + \tau U \approx \tau I$$
$$\text{cond}(H + \tau I) \approx \text{cond}(\tau I) = \|\tau U\| \cdot \left\|(\tau I)^{-1}\right\| = \tau \cdot 1 \cdot \frac{1}{\tau} = 1$$

поэтому в 15.11 СЛАУ хорошо обусловлена

Алгоритм 10 Метод Марквардта

Ввод $x^0, \tau_0, \beta, \varepsilon$
  $x = x_0$, вычислить $f(x)$
  повторять
    вычислить $\nabla f(x),\ H(x),\ \tau = \tau_0 \cdot \beta$
    повторять
      $\tau = \frac{\tau}{\beta}$
      СЛАУ: $(H(x) + \tau I)p = -\nabla f(x)$
      $y = x + p,\ f(y)$
    до тех пор пока $f(y) > f(x)$
    $x = y,\ f(x) = f(y),\ \tau_0 = \tau_0 \cdot \beta$
  до тех пор пока $\|p\| > \varepsilon$

Метод характеризуется:

- относительной простотой
- свойством убывания $f(x)$ при переходе от итерации к итерации
- высокой скоростью сходимости в окрестности x^*
- отсутствием процедуры одномерного поиска

В некоторых случаях метод Марквардта дополняют одномерным поиском, тогда

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$$
$$\alpha_k = \min_{\alpha} f(x^{k-1} + \alpha p^k)$$
$$\left(H(x^{k-1}) + \tau_k I\right) p^k = -\nabla f(x^{k-1})$$
$$\tau_k = \tau_{k-1} \cdot \beta$$

$\left\|x^k - x^{k-1}\right\| < \varepsilon$ —условие останова

15.2.3 Другая вариация метода

$$\left(H(x) + \tau I\right) p^k = -\nabla f(x)$$

Начать с $\tau = 0$
На каждой итерации проверять условие:

- $H(x) + \tau I > 0$ — положительно определена?
- если отрицательно определена, то $\tau = \max(1, 2\tau)$ и снова проверка

Примечание. Условие положительно определенной матрицы $H(x)+\tau I$ проверяется с помощью алгоритма Холецкого:

$$H(x) + \tau I = LL^T$$

, где L — нижнетреугольная матрица. Если разложение $H(x)+\tau I$ на LL^T возможно, то матрица > 0
Сложность этого алгоритма — $\frac{n^3}{3}$, сложность метода — число запусков алгоритма Холецкого
Метод Марквардта широко используется при решении задач, в которых целевая функция записывается в виде суммы квадратов

Лекция 16

16.1 Квазиньютоновские методы

- объединение достоинств
  1. наискорейшего спуска
  2. метода Ньютона
- не требует обращения матрицы H
- сохраняют высокую сходимость итерационной последовательности

16.1.1 Общий вид релаксационной последовательности

$$\begin{aligned} x^k &= x^{k-1} + \alpha_k p^k \\ p^k &= G_k w^k \quad k \in N \\ w^k &= -\nabla f(x^{k-1}) \end{aligned} \tag{16.1}$$

G_k — положительно определенная матрица $(n \times n)$ специального вида
Поскольку $G_k > 0$, то p^k задает направление спуска:

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

1. Вычисление матриц G_k
   $$\{G_k\} \xrightarrow[k\to\infty]{} H^{-1}(x^*)$$
   , где x^* — точка минимума
   На первой итерации полагают $G_1 = I$ — выполняется градиентный спуск
2. Параметр α_k в 16.1
   - задать $\alpha_k = 1$
   - применить дробление шага
   - использовать исчерпывающий спуск в направлении p^k (чаще всего используется на практике)

Поскольку $\{G_k\} \to \{H^{-1}(x^*)\}$, то G_k на завершающей стадии поиска близка к $H^{-1}(x^{k-1})$, используемой в методе Ньютона $\implies$ квазиньютоновские метода сохраняют высокую скорость сходимости, присущую методу Ньютона. Таким образом G_k должна быть близка к $H^{-1}(x^*)$ и G_k получают путем аппроксимации $H^{-1}(xk-1)$
Выбор удачной аппроксимации может существенно сократить объем вычислений по сравнению с обращением матрицы H, тем самым упростить процедуру построения направления спуска p^k — **идея квазиньютоновских методов**
Каждую G_{k+1} строят, корректирую ранее вычисленную матрицу G_k

$$G_{k+1} = G_k + \Delta G_k \quad k \in \mathbb{N} \tag{16.2}$$

ΔG_k — положительно определенная матрица $(n \times n)$ — **поправочная матрица**
Способ выбора ΔG_k определяет конкретный квазиньютоновский метод. На первой итерации $G_1 = I$

Пример. Пусть

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

, где A — положительно определенная
Тогда $\forall x : A = H$, $\nabla f(x) = Ax + b$
Введем: $\Delta w^k = w^k - w^{k-1}$, $\Delta x^k = x^k - x^{k-1}$, следовательно

$$\Delta w^k = \nabla f(x^{k-1}) - \nabla f(x^k) = A(x^{k-1} - x^k) = -A\Delta x^k$$

Таким образом, для квадратичной функции

$$A^{-1}\Delta w^k = -x^k, k \in \mathbb{N} \tag{16.3}$$

Иначе в виду 16.3 для общего случая потребуется, чтобы матрица G_{k+1} удовлетворяли условию

$$G_{k+1}\Delta w^k = -\Delta x^k \quad k \in \mathbb{N} \tag{16.4}$$

— **квазиньютоновское условие**

Для поправочных матриц условие 16.4 примет вид

$$\Delta G_k \Delta w^k = -\Delta x^k - G_k \Delta w^k$$

Этому условию удовлетворяют матрицы

$$\Delta G_k = -\frac{\Delta x^k y^T}{\langle \Delta w^k, y\rangle} - \frac{G_k \Delta w^k z^T}{\langle \Delta w^k, z\rangle} \tag{16.5}$$

$y, z \in E_n$ — выбираются произвольно, ΔG_k — симметричные матрицы(необходимое условие, чтобы аппроксимация H^{-1} давала симметричную матрицу)
Пусть в 16.5 $y = \Delta x^k$, $z = G_k w^k$ и учитывая 16.2, получим

$$G_{k+1} = G_k - \frac{\Delta x^k (\Delta x_k)^T}{\langle \Delta w^k, \Delta x^k\rangle} - \frac{G_k \Delta w^k (\Delta w^k)^T G_k^T}{\langle G_k \Delta w^k, \Delta w^K\rangle} \tag{16.6}$$

Формула 16.6 в сочетании с исчерпывающим спуском по направлениям векторов p^k — **метод Давидона-Флетчера-Пауэлла** (ДФП-метод)

- на первой итерации: $G_1 = I$, задается x^0

$$w^1 = -\nabla f(x^0) \quad p^1 = w^1$$

$$\alpha_1 = \min_{\alpha} f(x^0 + \alpha p^1)$$

$$x_1 = x^0 + \alpha p^1 \quad \Delta x^1 = x^1 - x^0$$

- $\forall k > 1$

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

$$\Delta w^k = w^k - w^{k-1}$$

$$v^k = G_{k-1}\Delta w^k$$

$$G_k = G_{k-1} - \frac{\Delta x^{k-1}(\Delta x^{k-1})^T}{\langle \Delta w^k, \Delta x^{k-1}\rangle} - \frac{v^k(v^k)^T}{\langle v^k, \Delta w^k\rangle}$$

$$p^k = G_k w^k$$

$$\alpha_k = \min_{\alpha} f(x^{k-1} + \alpha_k p^k)$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k \quad \Delta x^k = x^K - x^{k-1}$$

условие останова $\left\|\Delta x^k\right\| < \varepsilon$

16.1.2 Свойства метода ДФП

Свойство 1. *G_k по условию 16.6 сохраняет положительную определенность: если $G_k > 0$, то $G_{k+1} > 0$ (при условии $(\Delta x^k)^T \Delta\omega^k > 0$)*

Свойство 2. *Если в 16.6 G_k — симметричная, то G_{k+1} — симметричная*

Свойство 3. *При минимизации квадратичная функция с положительно определенной матрицей A метод ДФП сводится к методу сопряженных градиентов, т.к. первые n векторов p^k (задающих направление спуска) являются сопряженными относительно матрицы A. Следовательно ДФП-метод не более чем за n итераций дает точное решение квадратичной функции*

Свойство 4. *Матрицы G_k, вычисленные по ДФП-методу, связаны равенством*

$$G_k A p^i = p^i \quad i = \overline{1,k} \quad k = \overline{1,n}$$

При $k = n$ следует, что n векторов p^i являются собственными для симметричной матрицы $G_n A$, а соответствующие собственные значения равны 1. Следовательно $G_n A = I$ и $G_n = A^{-1}$, т.е. G_n оказывается обратной к матрице Гессе $H(x^*) = A$ квадратичной функции в точке x^*

Свойство 5. *Если $f(x)$ не является квадратичной, то ДФП-метод не позволяет найти минимум за конечное число итераций.*

Чтобы ослабить влияние накапливаемых погрешностей на сходимость итерационной последовательности и уменьшить вероятность появления после очередных n итераций линейно зависимых направлений спуска, в ДФП-методе применяют процедуру 'обновления' алгоритма: через каждые n итераций в качестве G_n используют $G_n = I$

Свойство 6. *Если $f(x)$ — квадратичная функция с $H > 0$, то ДФП-метод (с точным одномерным поиском) после n итераций дает*

$$H^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\Delta x^i (\Delta x^i)^T}{(\Delta x^i)^T \cdot \Delta w^i}$$

ДФП-метод очень чувствителен к точности одномерного поиска

16.1.3 Метод Бройдена-Флетчера-Шенно (БФШ-метод)

На первой итерации $G_1 = I$, затем

$$G_{k+1} = G_k - \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{\langle \Delta w^k, \Delta x^k \rangle} - \frac{G_k \Delta w^k (\Delta w^k)^T G_k^t}{\rho_k} + \rho_k r^k (r^k)^T \tag{16.7}$$

$$r^k = \frac{G_k \Delta w^k}{\rho_k} - \frac{\Delta x^k}{\langle \Delta x^k, \delta w^k \rangle}$$

$$\rho_k = \left\langle G_k \Delta w^k, \Delta w^k \right\rangle$$

16.1.4 Метод Пауэлла

На первой итерации $G_1 = I$, затем

$$G_{k+1} = G_k - \frac{\Delta \tilde{x}^k (\Delta \tilde{x}^k)^T}{\langle \Delta w^k, \Delta \tilde{x}^k \rangle} \quad k \in \mathbb{N} \tag{16.8}$$

$$\Delta \tilde{x}^k = \Delta x^k + G_k \Delta w^k$$

16.1.5 Способы построения G_k

- сохраняет свойство положительно определенности матрицы
- последовательность $\{G_k\} \xrightarrow[k \to \infty]{} H^{-1}(x^*)$

16.2 Сравнение методов

Методы:

- нулевого порядка (не используют значения производных)
- первого порядка (наискорейший спуск, сопряженные градиенты, квазиньютоновские методы)
- второго порядка(метод Ньютона и его модификации, метод Марквардта)

16.2.1 Сравнение по скорости

Методы порождают последовательность $\{x^k\}$:

$$\lim_{k\to\infty} x^k = x^*$$

тогда по свойству предела

$$\left\|x^{k+1} - x^*\right\| < \left\|x^k - x^*\right\|$$

поэтому

$$\frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} < 1$$

В этом случае говорят о сходимости метода

Пример. Если $f(x)$ — непрерывно дифференцируемая функция и $f(x) \to +\infty$ при $\|x\| \to +\infty$, то для любого x^0 метод наискорейшего спуска сходится к стационарной точке $f(x)$

- Глобальная сходимость методов сопряженных градиентов обеспечена с использованием рестартов. Тогда их глобальная сходимость следует из глобальной сходимости метода наискорейшего спуска
- Метод Ньютона не обладает свойством глобальной сходимости. Если x^0 далека от x^*, то метод не сходится

  Но метод Ньютона с одномерным поиском и направлением спуска и метод Марквардта обладают глобальной сходимостью
- Квазиньютоновсие методы ДФП и БФШ обладают глобальной сходимостью в случае применения рестартов

16.2.2 Оценка эффективности

Эффективность зависит от числа итераций
Если

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} = \alpha < 1 \quad \alpha \neq 0$$

,то сходимость линейная. Если

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} = 0$$

, то сходимость сверхлинейная. Если $\exists \gamma > 1$:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|^\gamma} < +\infty$$

то сходимость порядка γ. В частности при $\gamma = 2$ — квадратичная сходимость

- Методы сопряженных градиентов имеют сверхлинейную скорость сходимости по n шагам.

  Если $H(x)$ удовлетворяет условию Липшица, то эти методы имеют квадратичную сходимость по n шагам

- Квазиньютоновские методы ДФП и БФШ имеют сверхлинейную скорость сходимости

  Если $H(x)$ удовлетворяет условию Липшица, то эти методы имеют квадратичную скорость сходимости

  Это показывает преимущество квазиньютоновских методов перед методами сопряженных градиентов, которые требуют $\approx$ в n раз больше итераций для одного и того же асимптотического поведения. Однако это преимущество сильно снижается загрузкой памяти $\sim n^2$ и объемом промежуточных матричных вычислений $\sim n^2$

- Метод Ньютона имеет квадратичную локальную сходимость, если $H(x)$ удовлетворяет условию Липшица

  Следовательно в малой окрестности x^* метод Ньютона при указанных предположениях целевой функции $f(x)$ сходится быстрее остальных методов.