МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра Математической физики и вычислительной математики

Методы переменной метрики

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 411 группы

направление 01.03.02 — Прикладная математика и информатика

механико-математического факультета

Корсакова Игоря Олеговича

Научный руководитель
зав. каф., д.ф.-м.н., профессор В.А. Юрко

Зав. кафедрой
д.ф.-м.н., профессор В.А. Юрко

Саратов 2021

Введение. Задача оптимального логистического использования и расходования энергии при одновременном исчерпании ограниченных ресурсов и устаревании традиционных источников энергии, особо остро вставшая перед человечеством в новом тысячелетии, перевела теорию экстремальных задач в разряд особо важных. В качестве примера подобных проблем, стоящих перед современными исследователями, можно привести расчёт организации производства с получением максимальной прибыли с ограниченных ресурсов, разработку системы логистически совершенных электросетям, совершенствование сферы космических технологий, практическую значимость которой уже сложно оспорить, а также решение многих задач в различных отраслях.

На математическом языке такие задачи обозначаются как задачи отыскания экстремума (максимума или минимума) определенной функции $f(x)$, выражающего собой качество управления x из заданного множества X некого пространства. Требование принадлежности управления x некоторому множеству X выражает собой ограничения, как правило вытекающие из законов сохранения, ограниченности ресурсов, которыми есть возможность распоряжаться, фактической возможности технической реализации управления, минимизации нежелательных либо запрещенных состояний, исключение аварийных состояний и т.д. Задачи на отыскание экстремума $f(x)$ на множестве X в научной среде принято называть экстремальными. Важно отметить, что задача максимизации функции $f(x)$ на множестве X эквивалента задаче минимизации функции - $f(x)$ на том же множестве X, поэтому в случае необходимости можно ограничиться рассмотрением задач минимизации. Одними из вариантов решений поставленных задач являются методы переменной метрики, о которых уделено внимание в этой работе.

В работе исследована сходимость метода Давидона-Флетчера-Пауэлла и метода Пшеничного на примере функций двух переменных, одна из которых известна как функция Розенброка. Результаты показывают, что данные методы, могут использовать в практических целях, применительно к сложным функциях, которые могут встречаться на производстве и в технике.

Целью работы является численное исследование сходимости и устойчивости методов переменной метрики для нахождения минимума функций. Структура и содержание бакалаврской работы. Работа состоит из введения, девяти разделов, заключения и списка использованных источников, приложения А и приложения Б. В приложении А представлен код численных экспериментов, а приложении Б, результат работы программы. Общий объем работы составляет 50 страниц.

Во введении обосновывается актуальность темы работы, формулируется цель работы и решаемые задачи, отмечается практическая значимость полученных результатов.

Основное содержание работы. Основная часть состоит из девяти глав. В **первой** главе рассказывается об идейной стороне построения методов переменной метрики.

О методах переменной метрики.

Вводится класс методов, называемых методами переменной метрики, которые аппроксимируют матрицу Гессе или обратную к ней, но используют для этого только первые производные. При использовании методов переменной метрики новый вектор вычисляется по вектору предыдущего шага с помощью уравнения

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k = x_k + \alpha_k D_k = x_k - \alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k),$$

где Δx_k - вектор перехода от точки x_k в точку x_{k+1};
D_k -любой вектор в направлении Δx_k;
α_k - скаляр, определяемый соотношением $\Delta x_k = \alpha_k D_k$;
H_k - матрица направлений, представляющая собой аппроксимацию $G^{-1}(x)$.

Для всех градиентных методов $H_0 = H(x_0)$ является единичной матрицей, а для метода Ньютона представляет собой матрицу, обратную матрице Гессе целевой функции $G^{-1}(x)$. Однако при использовании $G^{-1}(x)$ было необходимо вычислять вторые частные производные $f(x)$ и обращать матрице Гессе $G(x)$, тогда как в методах переменной метрики для вычисления H_k используют различные соотношения, не требующие ничего из вышеперечисленного.

Если $f(x)$ квадратичная целевая функция, то есть

$$f(x) = a + x^T b + \frac{x^T G x}{2}$$

$$\bigtriangledown f(x) = b + Gx \tag{1}$$

то верно, что

$$\bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k) = G(x_{k+1} - x_k)$$

Умножая обе части на $G^{-1}(x_k)$, получим

$$x_{k+1} - x_k = G^{-1}(x_k)(\bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)) \tag{2}$$

При этом, если $f(x)$ квадратична, то $G(x_k) = G$, то есть постоянная матрица. Уравнение (2) можно рассматривать как систему n линейных уравнений, содержащих n неизвестных параметров, которые нужно оценить для того, чтобы аппроксимировать $G^{-1}(x)$ или $G(x)$ при заданных значениях $f(x)$, $\bigtriangledown f(x)$, Δx на более ранних этапах поиска. Для решения этих линейных уравнений могут быть использованы различные методы, каждый из которых приводит к различным методам переменной метрики. В довольно большой группе методов $G^{-1}(x_{k+1})$ аппроксимируется с помощью информации, полученной на k-ом шаге

$$G^{-1}(x_{k+1}) \approx H_k + \Delta H_k = H_{k+1},$$

где H - матрица, аппроксимирующая $G^{-1}(x)$
ΔH_k - представляет собой определяемую матрицу.
Выбор ΔH_k определяет метод переменной метрики.

Для обеспечения сходимости H_{k+1} должна быть положительно определенной и удовлетворять (2) в том случае, когда она заменяет G^{-1}.

На $k+1$ шаге мы знаем $x_k, \bigtriangledown f(x_k), \bigtriangledown f(x_{k+1}), H_k$ и хотим вычеслить H_{k+1}, чтобы удовлетворялось соотношение

$$H_{k+1}\Delta g_k = \Delta x_k,$$

где $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$
$\Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)$

Во **второй** главе определяется метод Давидона-Флетчера-Пауэлла.

В методе Давидона-Флетчера-Пауэлла, выбирается матрица ΔH, имеющая ранг 2. Матрица направлений перевычисляется таким образом, чтобы для квадратичной целевой функции n шагов она равнялась G^{-1}.

Исходная матрица $_0$ обычно выбирается в виде единичной матрицы то есть $H_0 = I$, но может быть и любой другой симметричной, положительно определенной матрицей, так что исходное направление минимизации - это направление наискорейшего спуска.

Одна итерация этого метода может быть записана в следующем виде:

$$D_k = -H_k \bigtriangledown f(x_k)$$

$$\sigma_k = \alpha_k D_k$$

$$\Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)$$

$$x_{k+1} = x_k + \sigma_k$$

$$H_{k+1} = H_k + A_k + B_k,$$

где

$$A_k = \frac{\sigma_k \sigma_k^T}{\sigma_k^T \Delta g_k}, \ \ B_k = -\frac{H_k \Delta g_k \Delta^T g_k H_k}{\Delta^T g_k H_k \Delta g_k}. \tag{3}$$

Третья глава посвящена исследованию устойчивости и сходимости метода Давидона-Флетчера-Пауэлла.

Обычный градиентный метод устойчив, потому что он гарантирует, что минимизируемая функция уменьшается на каждом шаге. Так как $\bigtriangledown f(x_k)$ есть направление наискорейшего подъема, то вектор D_k будет направлением наискорейшего спуска тогда и только тогда, когда для всех $\bigtriangledown f(x_k)$:

$$(\bigtriangledown f(x_k), D_k) = (\bigtriangledown f(x_k), -H \bigtriangledown f(x_k)) < 0.$$

Стоит отметить, что в случае квадратичной целевой функции в алгоритме Давидона-Флетчера-Пауэлла используются сопряженные направления. Для того, чтобы последнее направление D_{k+1} было сопряжено по отношению ко всем предыдущим, должно выполнятся неравенство

$$(\bigtriangledown f(x_{k+1}), \alpha_k D_k) = 0 \Longleftrightarrow (\bigtriangledown f(x_{k+1}), \sigma_k) = 0 \tag{4}$$

Тогда

$$\sigma_k^T \Delta g_k = \sigma_k^T \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \sigma_k^T \bigtriangledown f(x_k) = -\sigma_k^T \bigtriangledown f(x_k =)$$

$$= -\alpha_k D_k^T \bigtriangledown f(x_k) = \alpha_k \bigtriangledown^T f(x_k) H_k \bigtriangledown f(x_k) > 0.$$

Следовательно, $x^T H_{k+1} x > 0$ для всех векторов $x \neq 0$. Таким образом, матрица H_{k+1} положительно определена и процесс является устойчивым.

Предположим, что $f(x)$ - квадратичная целевая функция. Доказывается, что в этом случае метод Давидона-Флетчера-Пауэлла находит минимум за n итераций.

В **четвертой** главе доказываются теоремы об основных свойствах метода Давидона-Флетчера-Пауэлла.

Теорема 1. *Если функция $f(x)$ ограничена снизу, ее градиент $\bigtriangledown f(x)$ удовлетворяет условию Липшица*

$$\| \bigtriangledown f(x) - \bigtriangledown f(y) \| \leq L \|x - y\| \tag{5}$$

$\forall x, y \in E^n$ и в методе $x = x_k - \alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k)$, $\alpha_k > 0$, где $\{H_k\}_1^\infty$ - последовательность произвольных симметричных матриц, удовлетворяющих условию

$$\rho \|y\|^2 \leq (H_k y, y) \leq R \|y\|^2,\ \rho > 0 \tag{6}$$

и α_k выбирается из условия

$$f(x_k - \alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k)) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha H_k \bigtriangledown f(x_k)), \tag{7}$$

то $\| \bigtriangledown f(x)\| \to 0$ при $k \to \infty$ $\forall x_0$.

Теорема 2. *Пусть $f(x)$ - дважды непрерывно дифференцируемая функция, причем ее матрица вторых производных удовлетворяет условиям*

$$m\|y\|^2 \leq (\bigtriangledown^2 f(x) y, y) \leq M \|y\|^2,\ \ M \geq m > 0$$

$\forall x, y \in E^n$, а последовательность $\{x_k\}$ строится по методу

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k D_k = x_k - \alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k),\ \alpha_k > 0,\ k = 1, 2, \dots,$$

где $\{H_k\}$ - последовательность симметричных матриц, удовлетворяющих условиям

$$\rho\|y\|^2 \leq (H_k y, y) \leq R\|y\|^2,\ \ \rho > 0$$

при любых $x, y \in E^n$ и параметр α_k выбирается из условия

$$f(x_k + \alpha_k D_k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha D_k)$$

то последовательность $\{x_k\}$ сходится к точке минимума со скоростью геометрической прогрессии.

В **пятой** главе приводится описание алгоритма Давидона-Флетчера-Пауэлла.

1) В точке x_0 вычисляется $\bigtriangledown f(x_0)$ и матрица $H_0 = I$.

2) На k-ом шаге определяется α_k путем минимизации $f(x_k - - \alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k))$ с помощью любого метода одномерного поиска.

3) Вычисляется вектор $\Delta x_k = -\alpha_k H_k \bigtriangledown f(x_k)$ и определяется точка $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$.

4) Вычисляется $\bigtriangledown f(x_{k+1}),\ \ \Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)$.

5) Проверить выполняются ли при $i = \overline{1, N}$ соотношения

$$\frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{f(x_k)} > \varepsilon_1 \quad \frac{\Delta x_{ik}}{x_{ik}} > \varepsilon_{2i},$$

где

$$\Delta x_k = (\Delta x_{1k}, \Delta x_{2k}, \dots, \Delta x_{nk})^T$$

$$x_k = (x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{nk})^T$$

$$\varepsilon_2 = (\varepsilon_{21}, \varepsilon_{22}, \dots, \varepsilon_{2n})^T$$

Если выполнено, то необходимо задать заново матрицу направлений, вычислив следующие матрицы

$$A_k = \frac{\Delta x_k \Delta^T x_k}{\Delta^T x_k \Delta g_k}$$

$$B_k = \frac{H_k \Delta g_k \Delta^T g_k H_k^T}{\Delta^T g_k H_k \Delta g_k}$$

Далее вычислить

$$H_{k+1} = H_k + A_k - B_k$$

в противном случае, итерации заканчиваются.

В **шестой** главе вводится метод Пшеничного.

Рассмотрим задачу минимизации квадратичной целевой функции

$$f(x) = a + x^T b + \frac{1}{2} x^T G x \tag{8}$$

где $x \in E^n$, G - невырожденная положительно определенная симметричная матрица.

Градиент этой функции

$$\bigtriangledown f(x) = b + Gx$$

Исследуем процесс

$$D_k = H_k z_k, \quad z_k = H_k^T \bigtriangledown f(x_k) \tag{9}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k D_k \tag{10}$$

$$\Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k) \tag{11}$$

$$H_{k+1} = H_k - \frac{D_k \Delta^T g_k}{D_k^T \Delta g_k} \tag{12}$$

$$G_{k+1}^{-1} = G_k^{-1} - \alpha_k \frac{D_k D_k^T}{D_k^T \Delta g_k} \tag{13}$$

где $k = \overline{0, n-1}$.

Начальные значения $x = x_0$, $H_0 = I$, а G_0^{-1} - нулевая матрица.

Сформулируем, теперь схему вычислительного алгоритма. Одна итерация может быть записана в виде:

$$1) H_0 = I,\ \ z_0 = 0,\ \ x = x_0$$

$$2) D_k = H_k H_k^T \bigtriangledown f(x_k),\ \ x_{k+1} = x_k - \alpha_k D_k$$

$$\Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)$$

$$H_{k+1} = H_k - \frac{D_k \Delta^T g_k}{D_k^T \Delta g_k}$$

$$W_{k+1} = W_k - \alpha_k \frac{D_k^T \bigtriangledown f(x_{k+1})}{D_k^T \Delta g_k} D_k,\ \ \alpha_k = \frac{\bigtriangledown^T f(x_k) D_k}{D_k^T G D_k}, \tag{14}$$

$$k = \overline{0, n-1}$$

$$3) \widetilde{x} = x_n - \sigma W_n$$

Таким образом, под одной итерацией будем понимать полное выполнение этапов $1) - 3)$.

В **седьмой** главе изучается минимизация произвольной целевой функции и алгоритм выбора шага метода.

Пусть теперь $f(x)$ - произвольная, непрерывно дифференцируемая функция, а $\bigtriangledown f(x)$ - ее градиент. При этом, уже нельзя ожидать, что процесс сойдется за одну итерацию.

Если шаги α_k выбирать из условия минимума $f(x_k - \alpha D_k)$ и из этого же условия выбирается σ, то процесс сойдется к локальному минимуму.

При каждом спуске вдоль направления D_k величина шага α может выбираться по следующему правилу.

Берется фиксированный шаг h и вычисляется значение $f(x_k - hD_k)$. Если $f(x_k - hD_k) \geq f(x_k)$, то в h делится на два, до тех пор, пока не удовлетворится неравенство $f(x_k - hD_k) < f(x_k)$.

После этого вычисляется $\widetilde{\alpha_k}$:

$$\widetilde{\alpha_k} = -h \frac{D_k^T \bigtriangledown f(x_k)}{D_k^T \Delta \widetilde{g_k}},$$

где $\Delta \widetilde{g_k} = \bigtriangledown f(x_k - hD_k) - \bigtriangledown f(x_k)$.

Такой выбор $\widetilde{\alpha_k}$ соответствует квадратичной интерполяции функции $f(x - \alpha D_k)$. Если $f(x)$ - квадратичная форма, то $\widetilde{\alpha_k}$ соответствует выбору α_k из условия минимума функции вдоль направления.

После этого сравниваются значения $f(x_k - hD_k)$ и $f(x_k - \widetilde{\alpha_k} D_k)$. В зависимости от того, какое из этих значений меньше, в качестве α выбирается h или $\widetilde{\alpha_k}$. Величина σ выбирается по следующему правилу. Полагалось, $\sigma = 1$, и если в полученной точке значение функции было меньше, то эта точка бралась за начальную для следующего цикла. Если же полученное значение в новой точке было больше, то $\sigma = 0$ и итерации продолжались.

В **восьмой** главе дается описания алгоритма Пшеничного.

Одна итерация может быть записана в виде:

1) В точке x_0 вычисляется $\bigtriangledown f(x_0)$ и матрица $H_0 = I$
2) Вычисляется вектор $D_k = H_k H_k^T \bigtriangledown f(x_k)$
3) Определяется α_k по правилу выше
4) Определяется точка $x_{k+1} = x_k - \alpha_k D_k$
5) Вычисляется $\bigtriangledown f(x_{k+1}),\ \ \Delta g_k = \bigtriangledown f(x_{k+1}) - \bigtriangledown f(x_k)$

$$H_{k+1} = H_k - \frac{D_k \Delta^T g_k}{D_k^T \Delta g_k},$$

$$W_{k+1} = W_k - \alpha_k \frac{D_k^T \bigtriangledown f(x_{k+1})}{D_k^T \Delta g_k} D_k,\ \ k = \overline{0, n-1}$$

6) Вычисляется $\widetilde{x} = x_n - \sigma w_n$.

В **девятой** главе дается описание на каких функциях проводился численный эксперимент и с помощью чего он был осуществлен.

Рассмотрим задачу нахождения минимума следующих функций двух переменных.

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2$$

Данная функция называется функцией Розенброка. Минимум у нее находится в точке $x_* = (1, 1)$.

В качестве начального приближения берется точку $x_0 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

Также, рассмотрим другую функцию

$$f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2 - 1)^2 + \left(\frac{3}{4}x_1^3 - x_2 + 0,9\right)^2$$

Минимум у этой функции находится в точке $x_0 = (-0,98170, 0,1904194)$. В качестве начального приближения берется точку $x_0 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$.

Заключение. В работе были рассмотрены методы переменной метрики на примере методов Давидона-Флетчера-Пауэлла и Пшеничного. Изучена сходимость и устойчивость методов. Рассмотрены различные вариации выбора шага методов. Рассмотрена минимизация произвольной функции методами переменной метрики. По результатам численных экспериментов на тестовых функциях, можно утверждать, что методы Давидона-Флетчера-Пауэлла и Пшеничного эффективно и быстро справляются с задачей минимизации функции в сравнении с методом сопряженных градиентов.