НАО «Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева»

Дисциплина «Методы оптимизации»

ЛЕКЦИЯ 13

Градиентный метод

Образовательная программа 6B06103 Математическое и компьютерное моделирование

Объём: 2 академических часа. **Место в рабочей программе:** лекция 13 «Методы многомерной оптимизации. Градиентный метод. Алгоритм метода».

Цель: освоить градиентный метод безусловной минимизации, научиться выбирать и проверять шаг, оценивать скорость сходимости и интерпретировать результаты вычислений.

План занятия: алгоритм градиентного метода; постоянный шаг и дробление; условия сходимости; спектральный анализ квадратичной задачи; влияние обусловленности; ручные итерации; программная реализация и самостоятельная работа.

Результаты обучения: студент записывает итерационный процесс, выводит допустимый интервал шага для квадратичной функции, различает ошибку по точке и по функции, сравнивает стратегии по точности и затратам, обнаруживает колебания и расходимость.

В лекции 12 были обоснованы направление спуска и правило Армихо. Теперь исследуем конкретный выбор направления: на каждой итерации двигаемся против градиента. Основное внимание уделяется постоянному шагу и его влиянию на сходимость. Точный одномерный поиск вдоль антиградиента будет подробно рассмотрен в лекции 14 [1–2].

1 Формула градиентного метода

Для дифференцируемой функции $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ рассматриваем задачу

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}).$$

Градиентный метод строит последовательность

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}^k), \quad k = 0,1,\ldots,$$

где $\mathbf{x}^0$ — начальное приближение, $\alpha_k > 0$ — шаг. Обозначим $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$.

В двумерном случае обе координаты обновляются по производным **в одной и той же старой точке**:

$$x_1^{k+1} = x_1^k - \alpha_k f_{x_1}(x_1^k, x_2^k),$$

$$x_2^{k+1} = x_2^k - \alpha_k f_{x_2}(x_1^k, x_2^k).$$

Если после обновления первой координаты использовать её новое значение при вычислении второй производной, получится другая схема. Поэтому в программе сначала вычисляют весь градиент, затем новый вектор координат.

Почему выбран антиградиент. Для единичного вектора $\mathbf{p}$ производная по направлению равна $\mathbf{g}_k^{\top}\mathbf{p}$. Её наименьшее значение $-\| \mathbf{g}_k \|_2$ достигается при $\mathbf{p} = -\mathbf{g}_k/\| \mathbf{g}_k \|_2$, если градиент

ненулевой. Ненормированный вектор $-\mathbf{g}_k$ задаёт то же направление, но другую длину перемещения при том же числовом шаге.

В этой лекции и программе используется **ненормированный антиградиент**. Длина перемещения равна $\alpha_k \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2$. Для нормированного направления тот же переход потребовал бы шага $\tilde{\alpha}_k = \alpha_k \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2$. Смешивать эти две параметризации в формулах выбора шага нельзя.

2 Порядок выполнения алгоритма

Для постоянного шага заранее задают $\alpha > 0$. На каждой итерации выполняют следующие действия.

1. Вычисляют $f_k = f(\mathbf{x}^k)$ и $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$.
2. Если $\parallel \mathbf{g}_k \parallel_2 \leq \varepsilon_g$, завершают расчёт по критерию стационарности.
3. Если достигнут предел числа итераций, завершают расчёт с отдельным сообщением о лимите.
4. Вычисляют пробную точку $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \alpha \mathbf{g}_k$.
5. Проверяют конечность значений и изменение точки, сохраняют данные итерации и продолжают расчёт.

Если шаг подбирается дроблением, между пунктами 3 и 4 выполняют поиск допустимого α_k. Значение функции в принятой пробной точке повторно используют на следующей итерации.

Начальная точка. В выпуклой задаче с подходящим шагом разные старты ведут к одному минимуму, если он единственный. В невыпуклой задаче старт может определять, к какой стационарной точке приблизится метод. Остановка по малому градиенту сама по себе не доказывает минимум; классификация из лекции 12 остаётся необходимой.

Что сохранять в журнале. Полезны номер k, координаты, f_k, норма градиента, принятый шаг и число отклонённых проб. При наличии известного точного решения дополнительно записывают ошибку по точке и по функции. Эти ошибки служат учебной проверкой, но не используются как доступные алгоритму сведения в общей задаче.

3 Уменьшение функции при постоянном шаге

Пусть градиент глобально липшицев с константой $L > 0$:

$$\parallel \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y}) \parallel_2 \leq L \parallel \mathbf{x} - \mathbf{y} \parallel_2.$$

По лемме о спуске, доказанной в лекции 12,

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) \leq f(\mathbf{x}^k) - \alpha \left(1 - \frac{L\alpha}{2}\right) \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2.$$

Если $0 < \alpha < 2/L$ и $\mathbf{g}_k \neq \mathbf{0}$, значение функции строго уменьшается. При $\alpha = 1/L$ получаем удобную оценку

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) \leq f(\mathbf{x}^k) - \frac{1}{2L} \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2.$$

Из неё видно, что далеко от стационарности уменьшение не может быть сколь угодно малым. Если функция ограничена снизу, суммирование даёт

$$\sum_{k=0}^{N-1} \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2 \leq 2L(f(\mathbf{x}^0) - f_{\text{low}}).$$

Следовательно, $\| \mathbf{g}_k \|_2 \to 0$. Более того,

$$\min_{0 \le k < N} \| \mathbf{g}_k \|_2^2 \le \frac{2L(f(\mathbf{x}^0) - f_{\text{low}})}{N}.$$

Это оценка наилучшей нормы градиента среди первых N точек, а не обещание монотонного убывания нормы на каждой итерации. Для невыпуклой задачи результат относится к приближению к стационарности и не гарантирует глобальный минимум.

Если L известно неточно. Завышенная оценка L даёт более осторожный шаг $1/L$. Заниженная оценка может привести к нарушению достаточного условия. Если глобальная оценка неизвестна, фактическую приемлемость шага можно контролировать дроблением.

4 Сходимость в выпуклой задаче

Пусть f выпукла, градиент липшицев и существует точка минимума $\mathbf{x}^*$. При $0 < \alpha \le 1/L$ справедливо

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^*) \le \frac{\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \|_2^2 - \| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^* \|_2^2}{2\alpha}.$$

Вывод. Выпуклость даёт $f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^*) \le \mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*)$. Лемма о спуске при $\alpha \le 1/L$ даёт уменьшение не менее $\alpha \| \mathbf{g}_k \|^2/2$. Складываем эти неравенства и используем тождество

$$\| \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^* \|_2^2 = \| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \|_2^2 - 2\alpha \mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}(\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*) + \alpha^2 \| \mathbf{g}_k \|_2^2.$$

Суммирование и монотонность значений функции приводят к оценке для $k \ge 1$:

$$f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^*) \le \frac{\| \mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^* \|_2^2}{2\alpha k}.$$

При $\alpha = 1/L$ правая часть равна $L \| \mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^* \|_2^2/(2k)$. Это сублинейная оценка порядка $1/k$: уменьшение гарантированной ошибки в десять раз может потребовать примерно десятикратного увеличения числа итераций.

Если функция дополнительно сильно выпукла с константой $m > 0$, то

$$\| \nabla f(\mathbf{x}) \|_2^2 \ge 2m(f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*)).$$

Совместно с леммой о спуске для $\alpha = 1/L$ это даёт

$$f(\mathbf{x}^{k+1}) - f(\mathbf{x}^*) \le \left(1 - \frac{m}{L}\right)(f(\mathbf{x}^k) - f(\mathbf{x}^*)).$$

Следовательно, ошибка по функции убывает не медленнее геометрической последовательности с множителем $1 - m/L$. Такое поведение называют линейной сходимостью. Здесь слово «линейная» относится к связи ошибок соседних итераций, а не к графику ошибки в обычных координатах.

5 Квадратичная модель и точная формула ошибки

Особенно наглядно градиентный метод исследуется для функции

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathsf{T}} A (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + f^*,$$

где $A = A^{\mathsf{T}} \succ 0$. Тогда

$$\nabla f(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*), \quad H = A.$$

Обозначим ошибку $\mathbf{e}_k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*$. При постоянном шаге

$$\mathbf{e}_{k+1} = (I - \alpha A)\mathbf{e}_k, \quad \mathbf{e}_k = (I - \alpha A)^k \mathbf{e}_0.$$

Поскольку A симметрична, она имеет ортонормированный базис собственных векторов $\mathbf{v}_i$ и положительные собственные значения λ_i. Если $\mathbf{e}_0 = \sum_i c_i \mathbf{v}_i$, то

$$\mathbf{e}_k = \sum_{i=1}^{n} c_i \, (1 - \alpha\lambda_i)^k \mathbf{v}_i.$$

Каждая собственная компонента ошибки изменяется независимо и умножается на $1 - \alpha\lambda_i$. Поэтому поведение многомерного метода сводится к нескольким геометрическим прогрессиям.

Пусть $m = \lambda_{\min}(A)$, $L = \lambda_{\max}(A)$. Сходимость **из любой начальной точки** имеет место тогда и только тогда, когда

$$|1 - \alpha\lambda_i| < 1 \quad \text{для всех } i,$$

то есть

$$0 < \alpha < \frac{2}{L}.$$

Если начальная ошибка не содержит компоненты в некотором собственном направлении, неустойчивость именно этой компоненты может не проявиться в конкретном запуске. Поэтому успешный опыт из одной специально выбранной точки не заменяет проверки интервала шага.

6 Скорость сходимости и оптимальный постоянный шаг

Для положительно определённой квадратичной задачи имеем

$$\| \mathbf{e}_{k+1} \|_2 \leq q(\alpha) \, \| \mathbf{e}_k \|_2,$$

$$q(\alpha) = \max_i |1 - \alpha\lambda_i| = \max\{|1 - \alpha m|, |1 - \alpha L|\}.$$

Равенство с крайними собственными значениями следует из выпуклости функции $|1 - \alpha\lambda|$ по λ на отрезке $[m, L]$. Если $q < 1$, то

$$\| \mathbf{e}_k \|_2 \leq q^k \, \| \mathbf{e}_0 \|_2.$$

Для квадратичной функции непосредственно из спектрального разложения следует также

$$f(\mathbf{x}^k) - f^* \leq q^{2k} (f(\mathbf{x}^0) - f^*).$$

Как выбрать лучший постоянный шаг. Минимизируем наихудший множитель $q(\alpha)$. Оптимум достигается при равных по модулю крайних множителях:

$$1 - \alpha m = -(1 - \alpha L).$$

Отсюда

$$\alpha_{\text{opt}} = \frac{2}{m + L}, \quad q_{\text{opt}} = \frac{L - m}{L + m}.$$

Это оптимальность среди постоянных скалярных шагов по наихудшему спектральному множителю. Она не означает, что этот шаг даёт наибольшее уменьшение функции на каждой отдельной итерации из любого старта.

Для шага $\alpha = 1/L$ множитель равен $1 - m/L$. Если $m = L$, квадратичная форма сферическая, шаг $1/L$ приводит в минимум за одну итерацию. Если $m \ll L$, оба множителя близки к единице и метод может потребовать много итераций.

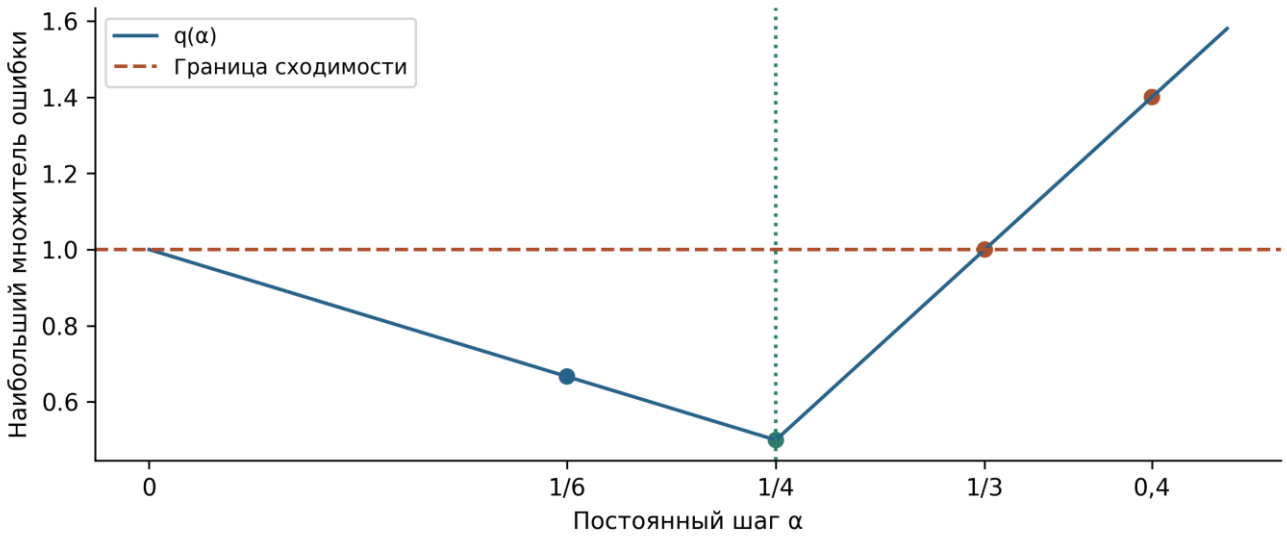


Рисунок 1 — Зависимость множителя ошибки от постоянного шага при $m = 2, L = 6$

На рисунке минимум q достигается при $\alpha = 1/4$. Условие $q < 1$ выполняется на интервале $(0,1/3)$. Точка $1/3$ — граница, не входящая в гарантированный интервал сходимости.

7 Подробный расчёт для основной функции

Продолжим пример предыдущих лекций:

$$f(x_1, x_2) = 2(x_1 - 1)^2 + 2(x_1 - 1)(x_2 + 1) + 2(x_2 + 1)^2 + 3.$$

Единственный минимум находится в точке $(1; -1)$ и равен 3. Обозначив $u = x_1 - 1$, $v = x_2 + 1$, получаем

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 4u + 2v \\ 2u + 4v \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Собственные значения равны $m = 2, L = 6$. Начальная точка, как в лекции 12, $\mathbf{x}^0 = (3; 0)$, поэтому $\mathbf{g}_0 = (10; 8)$ и $f_0 = 17$.

7.1 Постоянный шаг один на L

Выберем $\alpha = 1/6$. Первая итерация:

$$\mathbf{x}^1 = (3; 0) - \frac{1}{6}(10; 8) = \left(\frac{4}{3}; -\frac{4}{3}\right).$$

В новой точке $u = 1/3$, $v = -1/3$, поэтому

$$\mathbf{g}_1 = \left(\frac{2}{3}; -\frac{2}{3}\right), \quad f_1 = 3 + \frac{2}{9} = \frac{29}{9}.$$

Вторая итерация:

$$\mathbf{x}^2 = \left(\frac{4}{3}; -\frac{4}{3}\right) - \frac{1}{6}\left(\frac{2}{3}; -\frac{2}{3}\right) = \left(\frac{11}{9}; -\frac{11}{9}\right).$$

Теперь $u = 2/9$, $v = -2/9$, откуда

$$\mathbf{g}_2 = \left(\frac{4}{9}; -\frac{4}{9}\right), \quad f_2 = 3 + \frac{8}{81}.$$

k	x_1^k	x_2^k	f_k	$\| \mathbf{g}_k \|_2$
0	3	0	17	12,80625
1	1,333333	-1,333333	3,222222	0,942809
2	1,222222	-1,222222	3,098765	0,6285394
3	1,148148	-1,148148	3,043896	0,4190262
4	1,098765	-1,098765	3,019509	0,2793508
5	1,065844	-1,065844	3,008671	0,1862339

Спектральное объяснение. Собственный вектор $(1;1)/\sqrt{2}$ соответствует значению 6, а $(1;-1)/\sqrt{2}$ — значению 2. При шаге $1/6$ первая компонента ошибки обнуляется сразу, поскольку $1 - (1/6)6 = 0$. Вторая умножается на $2/3$.

Начальная ошибка равна $(2;1)$. После первой итерации она равна $(1/3;-1/3)$ и лежит только во втором собственном направлении. Для $k \geq 1$

$$\mathbf{e}_k = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{3}\right)^k (1;-1)^{\mathsf{T}}, \quad f_k - 3 = \frac{1}{2}\left(\frac{4}{9}\right)^k.$$

7.2 Оптимальный постоянный шаг

Теперь $\alpha_{\text{opt}} = 2/(2+6) = 1/4$. Первая точка равна $(0{,}5;-2)$, $f_1 = 6{,}5$; вторая — $(1{,}5;-0{,}75)$, $f_2 = 3{,}875$.

Оба собственных множителя имеют модуль $1/2$: для $\lambda = 2$ множитель положителен, для $\lambda = 6$ отрицателен. Поэтому одна компонента ошибки меняет знак, а другая сохраняет. В этой двумерной задаче

$$\| \mathbf{e}_k \|_2 = 2^{-k} \| \mathbf{e}_0 \|_2, \quad f_k - 3 = 4^{-k}(f_0 - 3).$$

На первой итерации шаг $1/6$ даёт меньшее значение функции, чем $1/4$. Однако его оставшаяся ошибка затем убывает с множителем $2/3$, а у шага $1/4$ — с множителем $1/2$. Сравнение только первой итерации может дать неверное представление о полном времени решения.

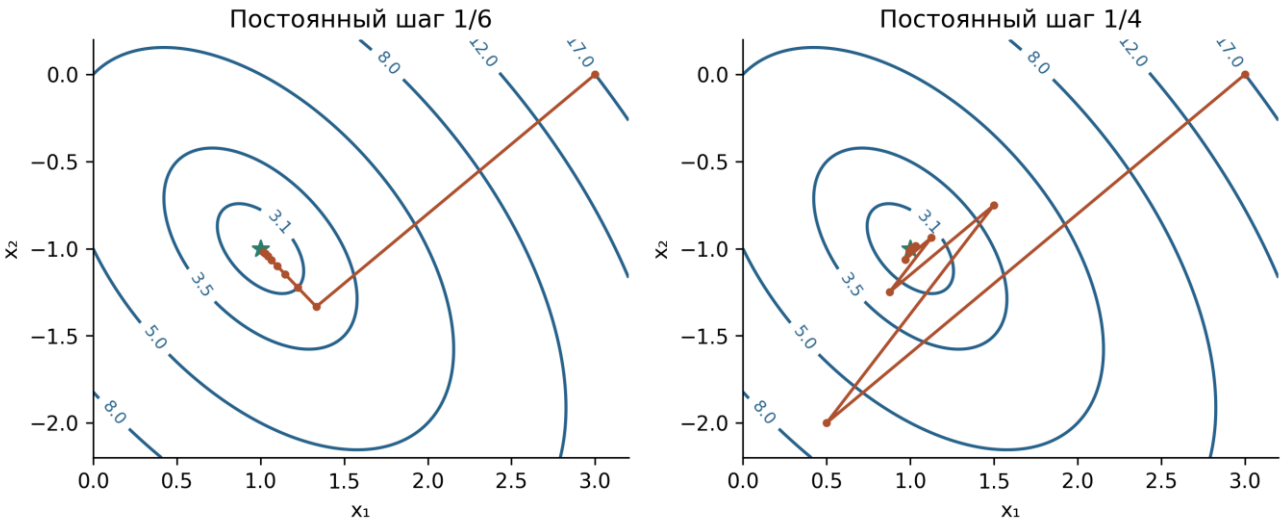


Рисунок 2 — Различные траектории для одной функции и одной начальной точки

На левом рисунке после первой итерации движение идёт вдоль одного собственного направления. На правом наблюдаются затухающие переходы с одной стороны минимума на другую. Звездой отмечена точная точка минимума.

8 Граница устойчивости и слишком большой шаг

При $\alpha = 2/L = 1/3$ множитель для собственного значения 6 равен -1. Соответствующая компонента ошибки меняет знак, но не уменьшается по модулю. Начальная ошибка $(2; 1)$ имеет ненулевую проекцию на это направление, поэтому метод не сходится к минимуму.

Разложение ошибки даёт

$$\mathbf{e}_k = \frac{3}{2}(-1)^k(1;1)^\mathsf{T} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}\right)^k (1;-1)^\mathsf{T}.$$

Следовательно,

$$f_k - 3 = \frac{27}{2} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{9}\right)^k.$$

Значения функции убывают к $16{,}5$, хотя минимум равен 3. Точки приближаются к двум различным положениям, чередуясь между ними. Это конкретный пример того, почему убывания значений недостаточно для правильного решения задачи.

При $\alpha = 0{,}4 > 1/3$ множитель для $\lambda = 6$ равен $-1{,}4$, и ошибка в этом направлении растёт. Уже первый шаг даёт

$$\mathbf{x}^1 = (3;0) - 0{,}4(10;8) = (-1;-3{,}2),$$

$$f(\mathbf{x}^1) = 29{,}48 > 17.$$

Переполнение при дальнейших итерациях является следствием неудачного шага, а не основанием увеличивать допустимое число итераций. Сначала следует исправить выбор шага.

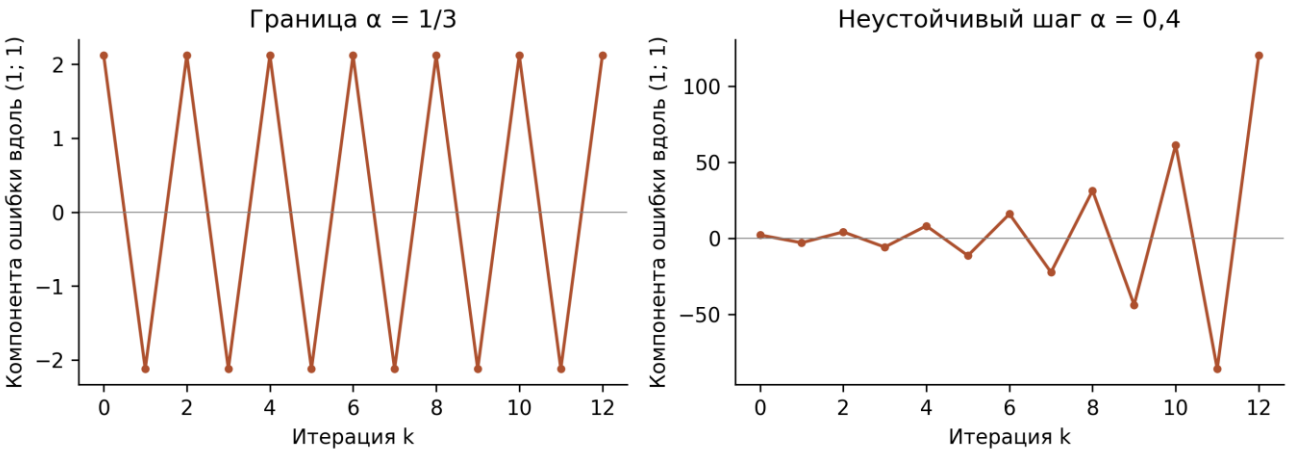


Рисунок 3 — Незатухающие колебания на границе и рост ошибки за её пределами

На вертикальной оси показана проекция ошибки на единичный вектор $(1;1)/\sqrt{2}$. Для граничного шага её модуль постоянен; для шага 0,4 модуль увеличивается в 1,4 раза за итерацию.

9 Градиентный метод с дроблением шага

Если подходящий постоянный шаг неизвестен, применяют условие Армихо из лекции 12:

$$f(\mathbf{x}^k - \alpha_k \mathbf{g}_k) \le f_k - \sigma \alpha_k \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2.$$

Начинают с пробного $\alpha_0 > 0$ и при нарушении условия заменяют α на $\beta\alpha$, где $0 < \beta < 1$. Здесь α_0 обозначает начальную величину для поиска на каждой итерации, а не обязательно первый принятый шаг.

В программе используются $\alpha_0 = 1$, $\beta = 1/2$, $\sigma = 0{,}1$. В основном примере первые пробы 1 и $1/2$ отклоняются, а $1/4$ принимается. Для этой конкретной задачи и старта тот же шаг принимается на всех итерациях до заданной точности; траектория совпадает с постоянным шагом $1/4$.

Совпадение траектории не означает одинаковых затрат. При известном постоянном шаге вычисляется одна новая функция за переход. При дроблении дополнительно вычисляются значения в отклонённых пробных точках. Поэтому сравнивают не только число итераций, но и число вычислений функции и градиента.

Для квадратичной функции можно независимо проверить принятие шага. Точное равенство

$$f(\mathbf{x} - \alpha \mathbf{g}) = f(\mathbf{x}) - \alpha \parallel \mathbf{g} \parallel_2^2 + \frac{\alpha^2}{2} \mathbf{g}^{\mathsf{T}} A \mathbf{g}$$

показывает, что при $\mathbf{g} \neq 0$ и $\alpha > 0$ правило Армихо эквивалентно

$$\alpha \le \frac{2(1-\sigma) \parallel \mathbf{g} \parallel_2^2}{\mathbf{g}^{\mathsf{T}} A \mathbf{g}}.$$

В отличие от спектрального интервала для всех направлений, эта граница зависит от текущего градиента. Принимается первая подходящая величина из геометрической последовательности проб.

10 Число обусловленности и масштаб переменных

Для положительно определённой квадратичной задачи число

$$\kappa = \frac{L}{m} \geq 1$$

характеризует отношение наибольшей и наименьшей кривизны. Через него множители записываются как

$$q(1/L) = 1 - \frac{1}{\kappa}, \quad q_{\text{opt}} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}.$$

Чем больше κ, тем ближе множители к единице. Линии уровня становятся вытянутыми: шаг ограничивается большой кривизной в одном направлении, а по направлению малой кривизны продвижение оказывается медленным.

Пример. Рассмотрим

$$F(x_1, x_2) = x_1^2 + 25x_2^2, \quad A = \text{diag}(2{,}50).$$

Здесь $m = 2$, $L = 50$, $\kappa = 25$, начальная точка $(2; 1)$. При шаге $1/L = 0{,}02$ имеем

$$x_1^{k+1} = 0{,}96x_1^k, \quad x_2^{k+1} = 0.$$

После первого перехода вторая координата уже равна нулю, но первая уменьшается медленно. При оптимальном постоянном шаге $1/26$ множители равны $12/13$ и $-12/13$, то есть по модулю примерно 0,92308.

Изменение масштаба. Введём $z_1 = x_1$, $z_2 = 5x_2$. Тогда $F = z_1^2 + z_2^2$, и Гессиан в новых координатах равен $2I$. Шаг $1/2$ приводит к минимуму за один переход из любой точки.

В исходных координатах этому соответствует масштабированный переход

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \frac{1}{2} D \nabla F(\mathbf{x}^k), \quad D = \text{diag}(1, 1/25).$$

Это уже изменение геометрии шага, а не просто выбор другого скалярного α. Для учебного диагонального примера масштаб известен точно. В общей задаче построение эффективного масштабирования требует дополнительной информации и вычислений.

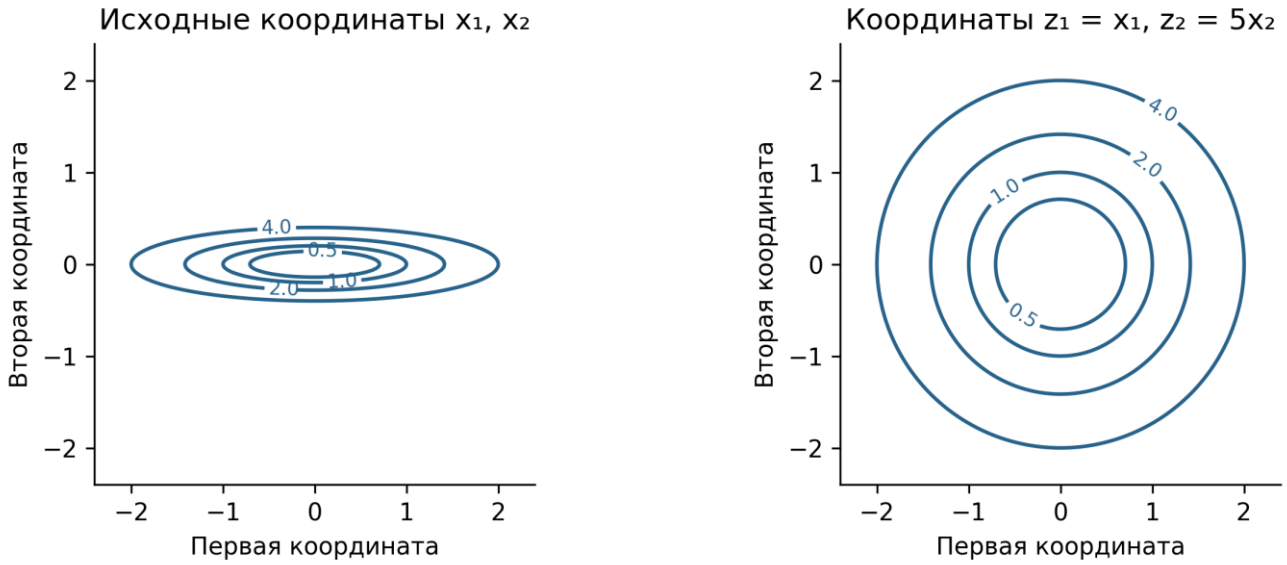


Рисунок 4 — Линии уровня до и после замены переменных

Равные масштабы осей позволяют увидеть различие между вытянутыми эллипсами и окружностями. Число обусловленности зависит от выбранных координат, поэтому изменение единиц измерения переменных может существенно влиять на работу метода.

11 Сравнение стратегий и точности

Сравним четыре стратегии из одного старта: постоянные шаги $0{,}1/L$, $1/L$, $2/(m+L)$ и дробление Армихо. Во всех запусках используется одинаковый критерий $\| \mathbf{g}_k \|_2 \leq 10^{-6}$ и предел 5000 итераций.

Задача	Стратегия	K	N_f	N_g
Основная	$0{,}1/L$	418	419	419
Основная	$1/L$	35	36	36
Основная	$2/(m+L)$	24	25	25
Основная	Армихо	24	73	25
Вытянутая	$0{,}1/L$	3793	3794	3794
Вытянутая	$1/L$	373	374	374
Вытянутая	$2/(m+L)$	222	223	223
Вытянутая	Армихо	175	989	176

Здесь K — число переходов до выполнения критерия, N_f и N_g — число вычислений функции и градиента внутри алгоритма. Начальная и конечная проверки учитываются. При постоянном шаге $N_f = N_g = K + 1$; при дроблении N_f включает отклонённые пробы. Расчёт графиков и учебных ошибок в эти счётчики не входит.

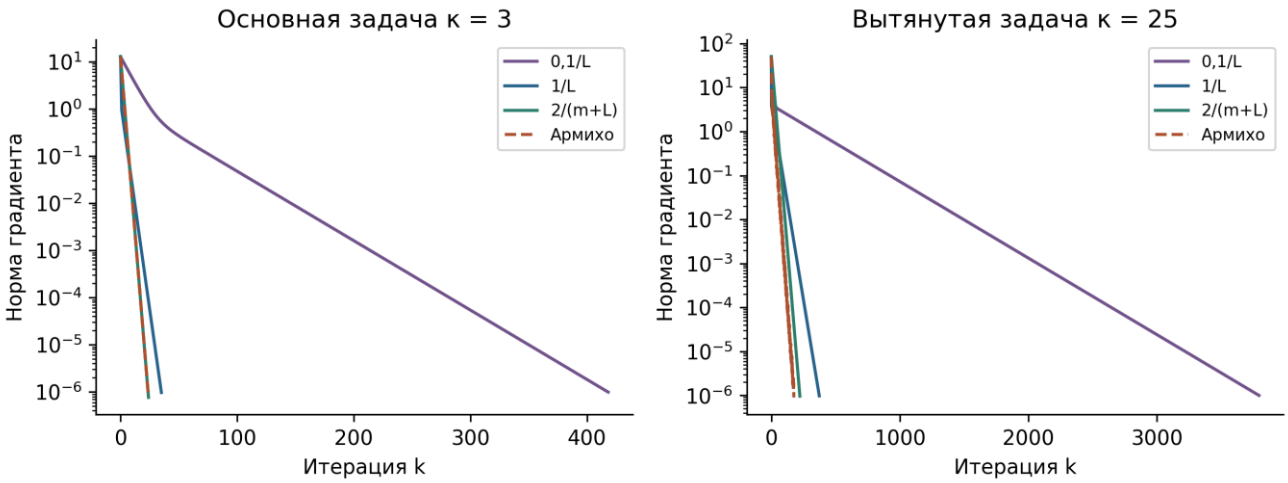


Рисунок 5 — Изменение нормы градиента при разных стратегиях шага

В основной задаче кривые оптимального постоянного шага и Армихо совпадают. В вытянутой задаче поведение дробления меняется по мере изменения направления градиента. Полученные числа относятся к указанным функциям, стартовым точкам и критерию; они не устанавливают универсального преимущества одного способа для всех задач.

Три разных ошибки. Расстояние $\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \|_2$, разность $f_k - f^*$ и норма градиента измеряют разные величины. Для квадратичной задачи

$$\frac{m}{2} \| \mathbf{e}_k \|_2^2 \le f_k - f^* \le \frac{L}{2} \| \mathbf{e}_k \|_2^2,$$

$$m \| \mathbf{e}_k \|_2 \le \| \mathbf{g}_k \|_2 \le L \| \mathbf{e}_k \|_2.$$

Поэтому критерий по градиенту даёт оценку расстояния $\| \mathbf{e}_k \|_2 \le \varepsilon_g / m$. При $m = 2$ и $\varepsilon_g = 10^{-6}$ расстояние не превосходит $5 \cdot 10^{-7}$ в точной математической модели. Для сильно выпуклой функции ошибка значения дополнительно оценивается величиной $\varepsilon_g^2/(2m)$.

Округление. При очень малой ошибке вычитание близких чисел $f_k - f^*$ теряет значащие цифры. В учебной программе поле gap вычисляется непосредственно как $\mathbf{e}_k^{\mathsf{T}} A \mathbf{e}_k / 2$. Точное решение используется только для проверки. Критерий остановки и выбор шага основаны на градиенте и значениях функции.

12 Реализация на Python

В архив входят gradient_method.py, variants.json и README.txt. Требуются Python 3.10 или новее, NumPy и Matplotlib. После распаковки откройте терминал в папке с программой:

```
python -m pip install numpy matplotlib
python gradient_method.py
python gradient_method.py --example ill
python gradient_method.py --variant 7
```

По умолчанию запускается сравнение четырёх стратегий. Для отдельного постоянного шага или дробления:

```
python gradient_method.py --method fixed
python gradient_method.py --method armijo
python gradient_method.py --method fixed --alpha 0.4 --max-iter 12
```

Последняя команда намеренно демонстрирует неустойчивость на основном примере. При запуске fixed без явного шага используется $1/L$. В Windows вместо python можно использовать py.

Параметр --output задаёт папку результатов, --tol — точность, --max-iter — предел числа переходов.

Главное обновление для постоянного шага имеет простой вид:

```
g = A @ (x - center)
if np.linalg.norm(g) <= tol:
    status = "gradient_tolerance"
else:
    candidate = x - alpha * g
```

Матрица A в программе является именно Гессианом. Если исходная функция записана как $au^2 + 2buv + cv^2 + d$, нужно взять $A = 2\begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$. Потеря множителя 2 меняет градиент, допустимый шаг и результаты.

Выходные файлы. summary.json содержит параметры и итоговые статусы. Файлы с окончанием iterations.csv содержат принятые точки, с окончанием trials.csv — пробы шага. Рисунок comparison.png показывает ошибки и норму градиента. Повторный запуск в ту же папку перезаписывает одноимённые файлы, поэтому для разных опытов удобно задавать разные папки.

Статус gradient_tolerance означает выполнение критерия по градиенту. Статус iteration_limit означает, что вычислительный бюджет исчерпан. stalled сообщает, что новая точка совпала со старой из-за округления; nonfinite — о неконечных значениях; line_search_failed — о неудаче поиска шага в пределах 60 проб. Такие сообщения нельзя заменять выводом «минимум найден».

Программа предназначена для положительно определённых квадратичных функций двух переменных. Собственные значения вычисляются один раз для учебного сравнения. В больших задачах получение точного спектра может быть дорогостоящим; градиентный метод сам по себе не требует вычисления Гессиана на каждой итерации.

13 Самостоятельная работа

Продолжаем использовать семейство из лекций 10–12:

$$f(x_1, x_2) = a(x_1 - s)^2 + 2b(x_1 - s)(x_2 - t) + c(x_2 - t)^2 + d.$$

Начальная точка $\mathbf{x}^0 = (s + 2; t + 1)$. В таблице сохранены прежние 18 вариантов.

№	a	b	c	s	t	d
1	2	1	2	-1	1	0
2	1	0	9	-1	-1	0
3	3	-1	2	-1	2	0
4	4	2	3	-1	0	0
5	1	0	25	-1	-2	0
6	5	-2	2	-1	1	0
7	2	1	2	0	1	3
8	1	0	9	0	-1	3
9	3	-1	2	0	2	3

№	a	b	c	s	t	d
10	4	2	3	0	0	3
11	1	0	25	0	-2	3
12	5	-2	2	0	1	3
13	2	1	2	1	1	-2
14	1	0	9	1	-1	-2
15	3	-1	2	1	2	-2
16	4	2	3	1	0	-2
17	1	0	25	1	-2	-2
18	5	-2	2	1	1	-2

Порядок выполнения.

1. Запишите градиент и Гессиан. Найдите точный минимум $(s; t)$ и значение d.
2. Вычислите m, L, κ. Укажите интервал постоянных шагов, обеспечивающий сходимость из любой начальной точки.
3. Для шага $1/L$ вручную выполните две итерации. На каждом шаге обе производные вычисляйте в одной старой точке.
4. Повторите две итерации для шага $2/(m + L)$. Сравните уменьшение функции на первой итерации и теоретические множители ошибки.
5. Разложите начальную ошибку по собственным векторам. Объясните, какие компоненты меняют знак и какие затухают медленнее.
6. Запустите программное сравнение четырёх стратегий. Составьте таблицу числа переходов, вычислений функции и градиента, итоговой ошибки.
7. Для шагов $2/L$ и $2{,}2/L$ выполните по 12 переходов. Проверьте наличие начальной компоненты в направлении $\lambda_{\max}$ и объясните наблюдаемое поведение.
8. Измените точность с 10^{-6} на 10^{-4}. Оцените изменение числа итераций и сопоставьте его с геометрическим законом сходимости.

Содержание отчёта: формулы своего варианта, спектральные характеристики, две ручные итерации для каждого из двух шагов, программная таблица сравнения, графики, анализ граничного и слишком большого шагов, вывод о точности и затратах.

13.1 Формулы для самопроверки

Гессиан и крайние собственные значения равны

$$A = \begin{pmatrix} 2a & 2b \\ 2b & 2c \end{pmatrix},$$

$$m = a + c - \sqrt{(a-c)^2 + 4b^2}, \quad L = a + c + \sqrt{(a-c)^2 + 4b^2}.$$

Во всех вариантах $a > 0$, $ac - b^2 > 0$, поэтому $m > 0$. В начальной точке

$$\mathbf{e}_0 = (2; 1)^{\mathsf{T}}, \quad \mathbf{g}_0 = (4a + 2b; 4b + 2c)^{\mathsf{T}},$$

$$f_0 = 4a + 4b + c + d.$$

Для любого постоянного шага

$$\mathbf{x}^1 = (s + 2 - \alpha(4a + 2b); t + 1 - \alpha(4b + 2c))^{\mathsf{T}}.$$

Последующие ошибки можно независимо проверять формулой $\mathbf{e}_k = (I - \alpha A)^k \mathbf{e}_0$. При $q \in (0,1)$ достаточное число переходов для относительного уменьшения нормы ошибки в $1/\eta$ раз, $0 < \eta < 1$, удовлетворяет

$$k \geq \frac{\ln \eta}{\ln q}.$$

Правую часть округляют вверх до целого. Это гарантированная оценка через наихудший множитель; фактическая ошибка может убывать быстрее, если соответствующая собственная компонента отсутствует.

14 Контрольные вопросы и задачи

1. Почему координаты градиентного метода обновляются одновременно?
2. Чем отличается нормированный антиградиент от ненормированного при одном числовом шаге?
3. Какие предпосылки нужны для оценки шага $0 < \alpha < 2/L$?
4. Почему сходимость градиента к нулю в невыпуклой задаче не доказывает глобальный минимум?
5. Как получается рекуррентная формула для ошибки квадратичной задачи?
6. Что означает отрицательный множитель $1 - \alpha\lambda_i$?
7. В каком смысле шаг $2/(m + L)$ является оптимальным?
8. Почему на границе $\alpha = 2/L$ возможны незатухающие колебания?
9. Как число обусловленности влияет на скорость сходимости?
10. Почему при одинаковых траекториях число вычислений функции может различаться?
11. Как связаны норма градиента, ошибка точки и ошибка значения?
12. Почему при вычислении очень малой разности $f_k - f^*$ следует учитывать округление?

Задача 1. Для $f(x, y) = (x^2 + 9y^2)/2$ найдите допустимый интервал постоянного шага, оптимальный постоянный шаг и его множитель.

Ответ. $m = 1$, $L = 9$, поэтому $0 < \alpha < 2/9$, $\alpha_{\text{opt}} = 1/5$, $q_{\text{opt}} = 4/5$. Из точки $(1; 1)$ первый переход с оптимальным шагом даёт $(0{,}8; -0{,}8)$.

Задача 2. Для той же функции из $(1; 1)$ возьмите шаг $1/9$. Запишите точку после $k \geq 1$ переходов.

Решение. Вторая координата обнуляется за один переход, первая умножается на $8/9$. Поэтому $\mathbf{x}^k = ((8/9)^k; 0)$ и $f_k = (8/9)^{2k}/2$.

Задача 3. При $q = 1/2$ требуется уменьшить гарантированную норму ошибки не менее чем в 1000 раз. Сколько переходов достаточно?

Ответ. $k \geq \ln(10^{-3})/\ln(1/2) \approx 9{,}966$, поэтому достаточно 10 переходов.

Задача 4. Для $f(x, y) = x^2 + 25y^2$ выполнено $\| \nabla f \|_2 \leq 10^{-4}$. Оцените расстояние до минимума и ошибку функции.

Ответ. При $m = 2$ расстояние не превосходит $5 \cdot 10^{-5}$, ошибка функции — $2{,}5 \cdot 10^{-9}$. Эти оценки используют сильную выпуклость, а не только факт малого изменения соседних значений.

15 Литература

[1] Kochenderfer M. J., Wheeler T. A. Algorithms for Optimization. Cambridge, MA: MIT Press, 2019. Chapter 5, § 5.1, pp. 69–71: градиентный метод; chapter 4, § 4.3, pp. 55–57: дробление шага и достаточное уменьшение. В настоящей лекции используется ненормированный антиградиент, как в алгоритме 5.1 книги.

[2] Рабочая программа дисциплины «Методы оптимизации», 2024. Образовательная программа 6B06103 «Математическое и компьютерное моделирование». Тема 13 «Методы многомерной оптимизации. Градиентный метод. Алгоритм метода».

[3] Учебные материалы дисциплины «Методы оптимизации». Лекция 11 «Дифференцирование функций многих переменных» и лекция 12 «Классический метод минимизации и основы методов спуска»: градиент, Гессиан, лемма о спуске, правило Армихо и условия минимума. В этой лекции их результаты применены к полному алгоритму и подробно проверены на квадратичных задачах.