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

Дисциплина «Методы оптимизации»

ЛЕКЦИЯ 14

Метод наискорейшего спуска

Образовательная программа 6B06103 Математическое и компьютерное моделирование

Объём: 2 академических часа. **Место в рабочей программе:** лекция 14 «Методы многомерной оптимизации. Метод наискорейшего спуска» [2].

Цель: освоить выбор шага посредством одномерной минимизации вдоль антиградиента, вывести формулу для квадратичной функции и научиться проверять точность и затраты вычислений.

План занятия: направление наискорейшего убывания; точный поиск шага; ортогональность соседних градиентов; квадратичная задача; сходимость и обусловленность; ручной расчёт; численный поиск шага; программа и самостоятельная работа.

Результаты обучения: студент составляет функцию вдоль луча, выводит её производную, вычисляет точный шаг в квадратичной задаче, объясняет зигзагообразную траекторию, различает точность внешних итераций и внутреннего поиска и сравнивает методы по вычислительным затратам.

В лекции 13 направление задавалось антиградиентом, а шаг выбирался постоянным или дроблением. Теперь на каждой итерации будем искать минимум функции вдоль выбранного луча. Это обеспечивает наибольшее уменьшение на текущем луче, однако не гарантирует наименьшее число последующих итераций. Все формулы ниже используют **ненормированный антиградиент** и евклидову норму [1, 3].

1 Направление наискорейшего убывания

Рассматривается безусловная минимизация дифференцируемой функции

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

В точке $\mathbf{x}$ обозначим $\mathbf{g} = \nabla f(\mathbf{x})$. Для единичного направления $\mathbf{p}$ производная по направлению равна

$$D_{\mathbf{p}} f(\mathbf{x}) = \mathbf{g}^{\mathsf{T}}\mathbf{p}, \qquad \| \mathbf{p} \|_2 = 1.$$

По неравенству Коши — Буняковского

$$\mathbf{g}^{\mathsf{T}}\mathbf{p} \geq -\| \mathbf{g} \|_2 \| \mathbf{p} \|_2 = -\| \mathbf{g} \|_2.$$

При $\mathbf{g} \neq \mathbf{0}$ равенство достигается для

$$\mathbf{p}_* = -\frac{\mathbf{g}}{\| \mathbf{g} \|_2}.$$

Таким образом, антиградиент задаёт наиболее быстрое **локальное** убывание в расчёте на единицу евклидовой длины. Этот вывод относится к линейной части приращения функции при малом перемещении. Для конечного перемещения необходимо отдельно подобрать длину шага.

Если $\mathbf{g} = \mathbf{0}$, направление по указанной формуле не определено. Алгоритм сначала проверяет критерий по норме градиента. В невыпуклой задаче нулевой градиент может соответствовать минимуму, максимуму или седловой точке; необходима классификация из лекции 12.

Нормировка направления. Мы записываем переход как $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} - \alpha\mathbf{g}$. Его длина равна $\alpha \parallel \mathbf{g} \parallel_2$. При использовании единичного направления тот же переход имеет вид $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x} + \tilde{\alpha}\mathbf{p}_*$, где $\tilde{\alpha} = \alpha \parallel \mathbf{g} \parallel_2$. Точки на луче совпадают, но числовые значения параметра шага различаются. Формулу для ненормированного направления нельзя без изменения подставлять в нормированную схему.

2 Одномерная задача выбора шага

Пусть в точке $\mathbf{x}^k$ вычислен ненулевой градиент $\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}^k)$. Вводится функция одной переменной

$$\varphi_k(\alpha) = f(\mathbf{x}^k - \alpha\mathbf{g}_k), \qquad \alpha \geq 0.$$

Метод наискорейшего спуска с точным поиском шага определяется соотношениями

$$\alpha_k \in \arg\min_{\alpha \geq 0} \varphi_k(\alpha),$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \alpha_k \mathbf{g}_k.$$

Здесь точка $\mathbf{x}^k$ и вектор $\mathbf{g}_k$ во время одномерного поиска **фиксированы**. Изменяется только α. После принятия новой точки градиент пересчитывают и строят новый луч.

Термины в литературе могут различаться: «градиентный спуск» и «наискорейший спуск» иногда обозначают общее движение по антиградиенту. В рамках этой лекции наискорейшим спуском называем схему с минимизацией вдоль луча. В коде отдельно различаем аналитически точную формулу для квадратичной функции и численное приближение к точному шагу.

Существование шага. Для произвольной гладкой функции минимум на луче может не достигаться. Например, у $f(x) = e^x$ функция $f(x - \alpha e^x)$ убывает при $\alpha \to +\infty$, но конечного минимизатора нет. Если f непрерывна и коэрцитивна, то есть $f(\mathbf{x}) \to +\infty$ при $\parallel \mathbf{x} \parallel_2 \to \infty$, минимум на ненулевом луче существует. Для строго выпуклой функции он единственен.

При ненулевом градиенте

$$\varphi_k'(0) = -\parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2 < 0.$$

Поэтому конечный минимум на луче не находится в его начале: $\alpha_k > 0$. Для внутренней точки минимума выполняется $\varphi_k'(\alpha_k) = 0$. В невыпуклой задаче одного этого равенства недостаточно: корень производной может не быть минимумом на всём луче.

3 Ортогональность соседних градиентов

По правилу дифференцирования сложной функции

$$\varphi_k'(\alpha) = -\nabla f(\mathbf{x}^k - \alpha\mathbf{g}_k)^{\mathsf{T}} \mathbf{g}_k.$$

Если одномерный минимум найден точно и является внутренним, то

$$0 = \varphi_k'(\alpha_k) = -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}} \mathbf{g}_k.$$

Следовательно,

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}} \mathbf{g}_k = 0.$$

В двух измерениях соседние ненулевые градиенты перпендикулярны. То же верно для соседних перемещений, поскольку каждое из них пропорционально соответствующему антиградиенту. Отсюда возникает зигзагообразная траектория [1, § 5.1].

Геометрическое объяснение. В новой точке производная вдоль прежнего направления стала нулевой. Линия движения касается линии уровня в смысле ортогональности её касательного направления новому градиенту. Для следующего улучшения требуется изменить направление движения.

Это свойство относится к соседним градиентам. Из него не следует взаимная ортогональность всех градиентов и завершение через n шагов. Метод наискорейшего спуска следует отличать от метода сопряжённых градиентов: для квадратичной задачи в последнем используются направления, сопряжённые относительно матрицы Гессе.

Численная проверка. При ненулевых градиентах удобно вычислять

$$\rho_k = \frac{\left|\mathbf{g}_{k+1}^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k\right|}{\|\,\mathbf{g}_{k+1}\,\|_2 \|\,\mathbf{g}_k\,\|_2}.$$

В точной арифметике $\rho_k = 0$. При численном поиске и округлении получается небольшое ненулевое значение. Если один из градиентов нулевой, отношение не определено и деление выполнять нельзя. Вблизи минимума относительное значение особенно чувствительно к погрешностям вычислений.

4 Формула шага для квадратичной функции

Пусть

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

где $A = A^{\mathsf{T}} > 0$. Тогда $\nabla f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$, а единственный минимум определяется системой $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$.

Вдоль антиградиента квадратичная функция имеет точное разложение

$$\varphi_k(\alpha) = f_k - \alpha\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k + \frac{\alpha^2}{2}\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}A\mathbf{g}_k.$$

Дифференцируя, получаем

$$\varphi_k{}'(\alpha) = -\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k + \alpha\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}A\mathbf{g}_k.$$

Поскольку A положительно определена и $\mathbf{g}_k \neq \mathbf{0}$, вторая производная $\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}A\mathbf{g}_k$ положительна. Единственный корень первой производной является минимумом:

$$\boxed{\alpha_k = \frac{\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\mathsf{T}}A\mathbf{g}_k}}.$$

Точный шаг — величина, обратная кривизне функции в текущем направлении. Числитель и знаменатель вычисляют по одному и тому же текущему градиенту.

Соглашение о матрице. Здесь A — именно Гессиан функции. Для записи $f(u,v) = au^2 + 2buv + cv^2 + d$ имеем

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

Если вместо неё подставить матрицу коэффициентов без множителя 2, получится шаг вдвое больше правильного. В обозначениях общей квадратичной формы вектор $\mathbf{b}$ и скалярный коэффициент b из вариантов имеют разный смысл.

После перехода градиент обновляется по формуле

$$\mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{g}_k - \alpha_k A\mathbf{g}_k.$$

Подставив найденный шаг, непосредственно проверяем $\mathbf{g}_{k+1}^{\top}\mathbf{g}_k = 0$. В учебной программе градиент новой точки вычисляется заново, чтобы сравнение точной формулы и численного поиска использовало одинаковую процедуру проверки.

5 Допустимые значения точного шага

Обозначим $m = \lambda_{\min}(A) > 0$, $L = \lambda_{\max}(A)$ и $\kappa = L/m$. Для любого ненулевого градиента

$$m \le \frac{\mathbf{g}_k^{\top} A\mathbf{g}_k}{\mathbf{g}_k^{\top}\mathbf{g}_k} \le L.$$

Обращая положительные величины, получаем

$$\frac{1}{L} \le \alpha_k \le \frac{1}{m}.$$

Если градиент направлен вдоль собственного вектора с собственным значением λ, шаг равен $1/\lambda$. В квадратичной задаче при такой начальной ошибке минимум достигается за один переход.

Почему шаг может превышать $2/L$. В лекции 13 интервал $0 < \alpha < 2/L$ обеспечивал сходимость одного постоянного шага для всех направлений. Здесь шаг подбирается заново для текущего направления. Он может быть больше $2/L$ и всё же строго уменьшать функцию. Его безопасность следует из минимизации конкретной φ_k, а не из универсального условия для постоянного шага.

Например, в основной задаче ниже $L = 6$, поэтому $2/L = 1/3$. На второй итерации точный шаг равен $41/84 \approx 0{,}488095 > 1/3$. Это не вызывает расходимости: в данный момент преобладает направление меньшей кривизны.

6 Уменьшение функции и оценка сходимости

Подстановка точного шага в квадратичное разложение даёт

$$f_k - f_{k+1} = \frac{(\mathbf{g}_k^{\top}\mathbf{g}_k)^2}{2\mathbf{g}_k^{\top} A\mathbf{g}_k} > 0.$$

Следовательно, значение функции строго убывает, пока градиент ненулевой. Но это не означает обязательного убывания нормы градиента на каждом шаге.

Контрпример для нормы градиента. Возьмём $A = \operatorname{diag}(1{,}100)$, $\mathbf{x}^* = (0;0)$ и $\mathbf{x}^0 = (1;0{,}001)$. Тогда $\mathbf{g}_0 = (1;0{,}1)$ и $\alpha_0 = 1{,}01/2 = 0{,}505$. Получаем $\mathbf{x}^1 = (0{,}495;-0{,}0495)$, $\mathbf{g}_1 = (0{,}495;-4{,}95)$. Значение функции уменьшается с 0,50005 до 0,245025, а норма градиента возрастает примерно с 1,005 до 4,975. Нельзя объявлять ошибку алгоритма только по временному росту этой нормы.

6.1 Гарантия для гладкой сильно выпуклой функции

Пусть f глобально m-сильно выпукла, а её градиент глобально липшицев с константой L. Точный поиск выбирает точку не хуже пробного шага $1/L$:

$$f_{k+1} \le f(\mathbf{x}^k - \mathbf{g}_k/L) \le f_k - \frac{1}{2L}\,\|\,\mathbf{g}_k\,\|_2^2.$$

Из сильной выпуклости следует $\|\,\mathbf{g}_k\,\|_2^2 \ge 2m(f_k - f^*)$. Поэтому

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

Эта оценка доказывает линейную сходимость по значению функции при указанных предпосылках. Для общего невыпуклого случая такую гарантию переносить нельзя.

6.2 Более точная оценка квадратичной задачи

Пусть $\mathbf{e}_k = \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*$. Тогда

$$f_k - f^* = \frac{1}{2}\mathbf{e}_k^{\top} A \mathbf{e}_k = \frac{1}{2}\mathbf{g}_k^{\top} A^{-1} \mathbf{g}_k.$$

Для симметричной положительно определённой матрицы справедлива оценка

$$\frac{(\mathbf{g}^{\top} A \mathbf{g})(\mathbf{g}^{\top} A^{-1} \mathbf{g})}{(\mathbf{g}^{\top}\mathbf{g})^2} \le \frac{(L+m)^2}{4Lm}.$$

Её можно получить без вычисления обратной матрицы в алгоритме. Разложим $\mathbf{g}$ по ортонормированным собственным векторам и введём веса $w_i = g_i^2 / \|\,\mathbf{g}\,\|_2^2$, сумма которых равна 1. Для $m \le \lambda_i \le L$ имеем

$$\lambda_i + \frac{mL}{\lambda_i} \le m + L.$$

Обозначим $X = \sum_i w_i \lambda_i$ и $Y = \sum_i w_i / \lambda_i$. Тогда $X + mLY \le m + L$. Из $(X - mLY)^2 \ge 0$ следует $4mLXY \le (X + mLY)^2 \le (m+L)^2$, что и доказывает оценку.

Разделив точное уменьшение на $f_k - f^*$, получаем

$$\frac{f_{k+1} - f^*}{f_k - f^*} = 1 - \frac{(\mathbf{g}_k^{\top}\mathbf{g}_k)^2}{(\mathbf{g}_k^{\top} A \mathbf{g}_k)(\mathbf{g}_k^{\top} A^{-1} \mathbf{g}_k)}.$$

Следовательно,

$$f_{k+1} - f^* \le q^2 (f_k - f^*), \qquad q = \frac{L - m}{L + m} = \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1}.$$

После k переходов $f_k - f^* \le q^{2k}(f_0 - f^*)$. В энергетической норме $\|\,\mathbf{e}\,\|_A = \sqrt{\mathbf{e}^{\top} A \mathbf{e}}$ это означает $\|\,\mathbf{e}_k\,\|_A \le q^k \,\|\,\mathbf{e}_0\,\|_A$.

Если $L = m$, то $A = mI$ и минимум достигается за один переход. При большом κ множитель q близок к единице: даже точный поиск шага может давать медленную сходимость. Оценка является гарантией для худшего случая; фактический результат зависит от начальной ошибки.

7 Подробный ручной расчёт

Продолжим пример лекции 13:

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

Единственный минимум: $\mathbf{x}^* = (1; -1)$, $f^* = 3$. Гессиан и градиент равны

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} 4(x_1 - 1) + 2(x_2 + 1) \\ 2(x_1 - 1) + 4(x_2 + 1) \end{pmatrix}.$$

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

7.1 Первый переход

Вычисляем $A\mathbf{g}_0 = (56; 52)$, затем

$$\mathbf{g}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_0 = 164, \qquad \mathbf{g}_0^{\mathrm{T}} A \mathbf{g}_0 = 976.$$

Функция на первом луче имеет вид

$$\varphi_0(\alpha) = 17 - 164\alpha + 488\alpha^2.$$

Из равенства $\varphi_0'(\alpha) = -164 + 976\alpha = 0$ находим

$$\alpha_0 = \frac{41}{244} \approx 0{,}168032787.$$

Следовательно,

$$\mathbf{x}^1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{41}{244}\begin{pmatrix} 10 \\ 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 161/122 \\ -82/61 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1{,}319672131 \\ -1{,}344262295 \end{pmatrix}.$$

Новый градиент и значение функции:

$$\mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 36/61 \\ -45/61 \end{pmatrix}, \qquad f_1 = \frac{393}{122} \approx 3{,}221311475.$$

Проверяем ортогональность: $10 \cdot 36/61 + 8 \cdot (-45/61) = 0$. Точное уменьшение равно $17 - 393/122 = 1681/122$, что совпадает с $164^2/(2 \cdot 976)$.

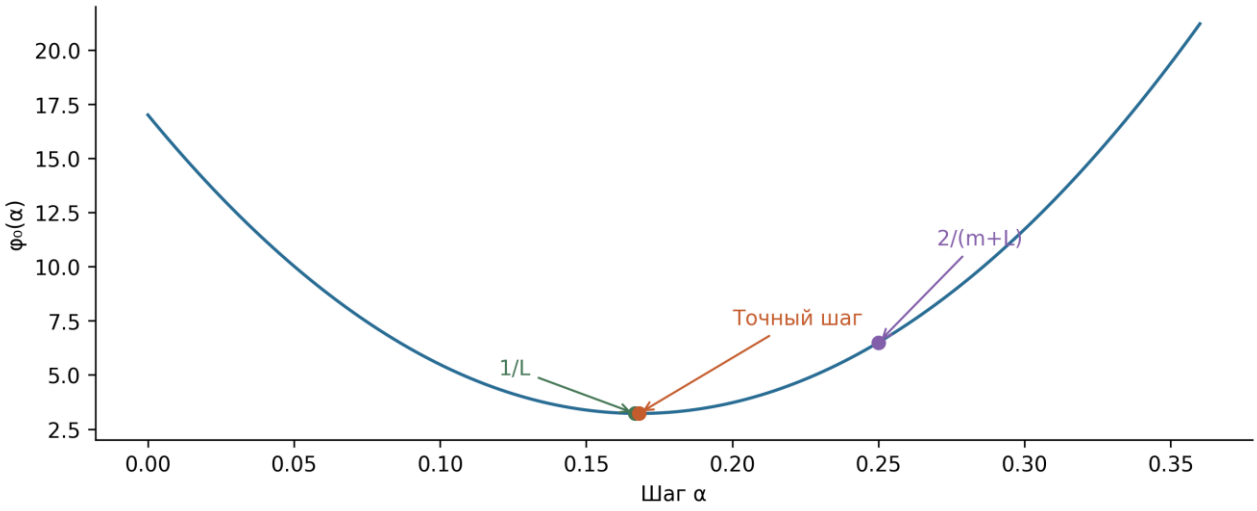


Рисунок 1 — Значение функции вдоль первого луча и три способа выбора шага

Шаг $1/L = 1/6$ близок к точному и даёт $f_1 = 29/9 \approx 3{,}222222$. Оптимальный постоянный шаг $2/(m+L) = 1/4$ даёт $f_1 = 6{,}5$. Слово «оптимальный» для постоянного шага относится к наихудшему спектральному множителю на всех итерациях, а не к минимуму текущей одномерной функции.

7.2 Второй переход

Для $\mathbf{g}_1 = (36; -45)/61$ получаем $A\mathbf{g}_1 = (54; -108)/61$. Поэтому

$$\alpha_1 = \frac{36^2 + 45^2}{36 \cdot 54 + (-45)(-108)} = \frac{3321}{6804} = \frac{41}{84} \approx 0{,}488095238.$$

Новая точка равна

$$\mathbf{x}^2 = \begin{pmatrix} 881/854 \\ -1681/1708 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1{,}031615925 \\ -0{,}984192037 \end{pmatrix}.$$

При этом $\mathbf{g}_2 = (135/854; 54/427)$ и $f_2 \approx 3{,}003498484$. Проверка даёт $\mathbf{g}_1^{\mathsf{T}}\mathbf{g}_2 = 0$.

Ошибка после двух переходов пропорциональна начальной:

$$\mathbf{e}_2 = \frac{27}{1708}\mathbf{e}_0.$$

В точной арифметике шаги данного примера чередуются: $41/244$, $41/84$, затем снова $41/244$ и так далее. После каждых двух переходов ошибка умножается на $27/1708 \approx 0{,}015807963$. Это свойство конкретной двумерной задачи и старта; оно не является общей формулой для произвольной нелинейной функции.

7.3 Первые строки журнала

k	x_1^k	x_2^k	f_k	**Шаг**
0	3	0	17	—
1	1,319672	-1,344262	3,221311	0,1680328
2	1,031616	-0,984192	3,003498	0,4880952
3	1,005053	-1,005442	3,000055	0,1680328
4	1,0005	-0,9997501	3,000001	0,4880952
5	1,00008	-1,000086	3	0,1680328

Значения в таблице округлены: запись $f_k = 3$ не означает точного достижения минимума. Шаг в строке $k > 0$ относится к переходу из точки $k-1$ в точку k. В начальной строке шага ещё нет. В программе сохраняются дополнительные столбцы нормы градиента, ошибки, ортогональности и вычислительных затрат.

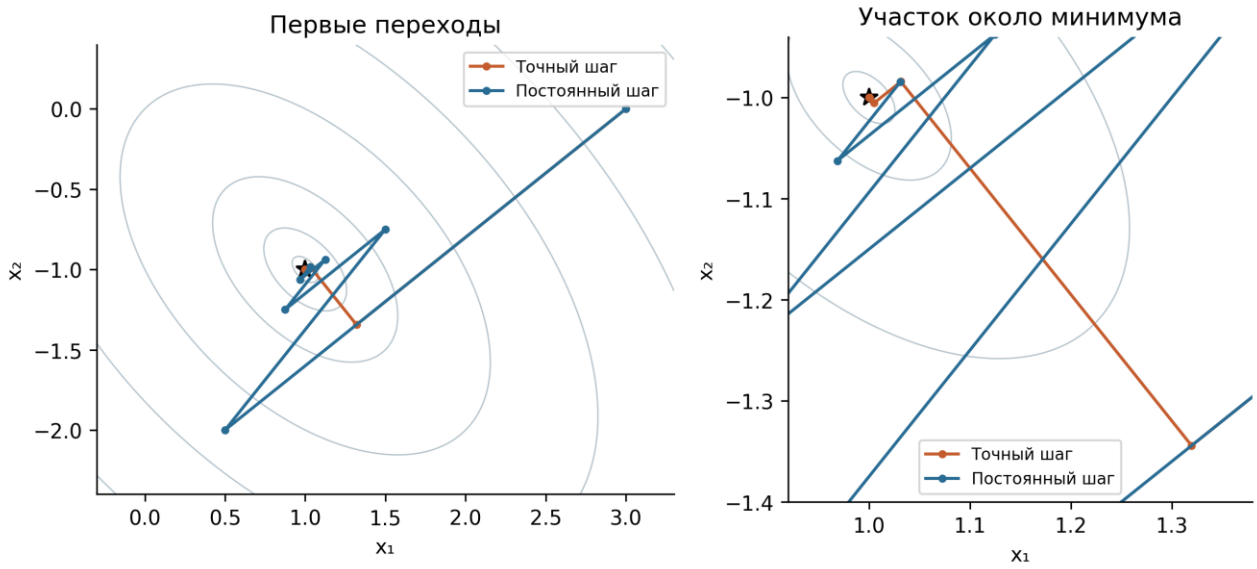


Рисунок 2 — Точный и постоянный шаги на одной квадратичной функции

Левая часть показывает начальные переходы, правая — увеличенный участок около минимума. При точном поиске соседние направления перпендикулярны в евклидовой геометрии; масштаб обеих координат на каждом графике одинаков.

8 Обусловленность и влияние начальной точки

Рассмотрим вытянутую квадратичную функцию

$$F(x_1, x_2) = x_1^2 + 25x_2^2, \qquad A = \operatorname{diag}(2{,}50), \qquad \kappa = 25.$$

Гарантированный множитель энергетической ошибки равен $q = 12/13 \approx 0{,}923077$. Из старта $(2; 1)$ точный метод в программном опыте достигает нормы градиента 10^{-6} за 17 переходов. Однако по одному удачному старту нельзя судить о скорости для всех начальных точек.

Выберем $\mathbf{x}^0 = (1; 1/25)$. Тогда $\mathbf{g}_0 = (2; 2)$: компоненты градиента по направлениям минимальной и максимальной кривизны имеют одинаковые модули. Первый шаг равен

$$\alpha_0 = \frac{2^2 + 2^2}{2 \cdot 2^2 + 50 \cdot 2^2} = \frac{1}{26}.$$

После перехода первая компонента умножается на $12/13$, а вторая на $-12/13$. Модули компонент градиента снова равны. Поэтому на всех итерациях $\alpha_k = 1/26$ и

$$x_1^k = \left(\frac{12}{13}\right)^k, \qquad x_2^k = \frac{1}{25}\left(-\frac{12}{13}\right)^k.$$

Отсюда

$$\| \mathbf{g}_k \|_2 = 2\sqrt{2}\left(\frac{12}{13}\right)^k, \qquad F_k = \frac{26}{25}\left(\frac{12}{13}\right)^{2k}.$$

Здесь теоретическая оценка достигается как равенство. Для нормы градиента не более 10^{-6} требуется

$$k \geq \frac{\ln\left(10^{-6}/\left(2\sqrt{2}\right)\right)}{\ln(12/13)},$$

то есть 186 переходов после округления вверх. Один и тот же Гессиан может давать заметно разную скорость при разных стартах.

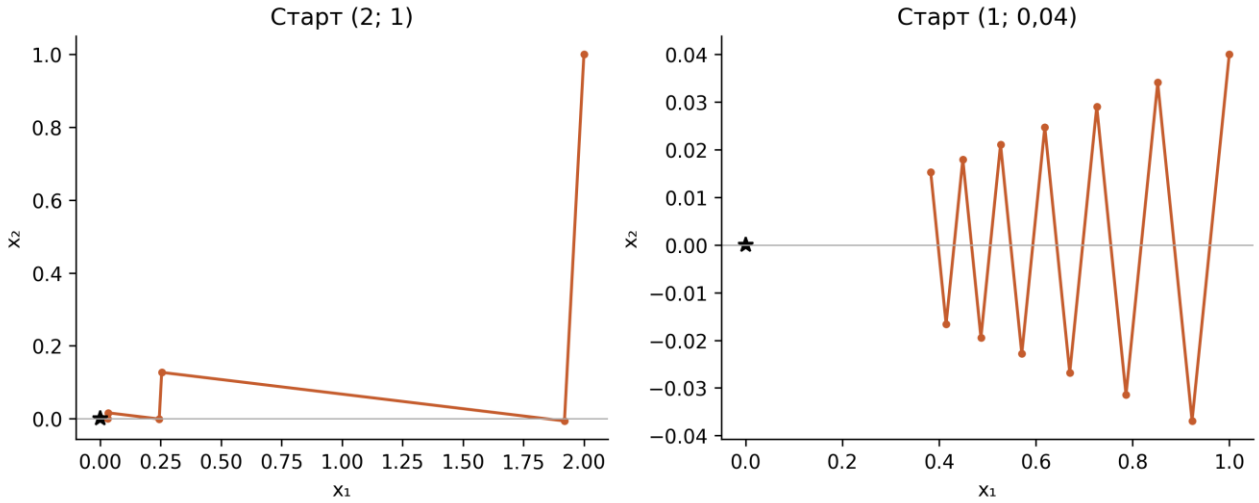


Рисунок 3 — Первые 12 переходов точного метода при двух начальных точках

На этом рисунке масштабы осей различаются, чтобы показать небольшие колебания второй координаты; углы между отрезками по изображению измерять нельзя. Ортогональность проверяется скалярным произведением. Во втором случае движение поперёк узкого направления чередуется по знаку, а продвижение к минимуму остаётся медленным.

Изменение масштаба переменных, рассмотренное в лекции 13, может улучшить геометрию задачи. Более сложные методы используют дополнительную информацию о кривизне или предыдущих направлениях. В лекции 15 перейдём к покоординатному спуску и методу Ньютона.

9 Численный поиск шага для нелинейной функции

Если функция не квадратична, постоянная матрица A обычно отсутствует, поэтому формула $\alpha_k = (\mathbf{g}_k^{\top}\mathbf{g}_k)/(\mathbf{g}_k^{\top}A\mathbf{g}_k)$ не даёт точного минимума вдоль луча. Подстановка текущего Гессиана минимизирует только локальную квадратичную модель.

Одномерную задачу можно решать методами предыдущих лекций. Если φ_k строго выпукла, её производная строго возрастает и имеет не более одного корня. Тогда удобно найти смену знака $\varphi_k{}'$ и использовать деление интервала пополам.

1. Вычислить $\varphi_k{}'(0) = -\| \mathbf{g}_k \|_2^2 < 0$.
2. Взять правую границу $b = 1$. Пока $\varphi_k{}'(b) < 0$, увеличивать b вдвое, сохраняя последнюю отрицательную пробу как левую границу.
3. Получив интервал $[a, b]$ с противоположными знаками, вычислять середину $c = (a + b)/2$.
4. Если $\varphi_k{}'(c) < 0$, заменить a на c; иначе заменить b на c.
5. Завершить поиск по заданной точности производной; принять точку $\mathbf{x}^k - c\mathbf{g}_k$.

При точном нуле на любом этапе шаг принимается сразу. Смена знака гарантирует единственный минимум для строго выпуклой функции на луче. Для невыпуклой функции тот же поиск не гарантирует глобальный минимум; могут существовать несколько корней или вообще отсутствовать конечный минимизатор.

Если длина начального интервала равна $b-a$, после j делений она равна $(b-a)/2^j$. Чтобы обеспечить длину не более ε_α, достаточно

$$j \geq \left\lceil \log_2 \frac{b-a}{\varepsilon_\alpha} \right\rceil$$

при $b-a > \varepsilon_\alpha$. Это оценка по длине интервала. В приложенной программе используется другой, относительный критерий по производной, поэтому фактическое число проб не следует напрямую из этой формулы.

9.1 Нелинейный пример

Рассмотрим строго выпуклую функцию

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{4}x_1^4 + \frac{1}{2}x_1^2 + 2x_2^2.$$

Её градиент и Гессиан равны

$$\nabla f = \begin{pmatrix} x_1^3 + x_1 \\ 4x_2 \end{pmatrix}, \qquad H = \begin{pmatrix} 3x_1^2 + 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Гессиан положительно определён во всех точках, функция коэрцитивна и имеет единственный минимум $(0;0)$ со значением 0. Глобальной конечной константы Липшица градиента здесь нет, поскольку $3x_1^2 + 1$ не ограничено. Поэтому глобальную оценку из раздела 6.1 нельзя применять без дополнительного обоснования локальных границ на рассматриваемой области.

При $\mathbf{x}^0 = (1;1)$ имеем $\mathbf{g}_0 = (2;4)$ и

$$\varphi_0(\alpha) = \frac{1}{4}(1-2\alpha)^4 + \frac{1}{2}(1-2\alpha)^2 + 2(1-4\alpha)^2.$$

Дифференцируя, получаем

$$\varphi_0'(\alpha) = -2[(1-2\alpha)^3 + (1-2\alpha)] - 16(1-4\alpha).$$

Её вторая производная положительна:

$$\varphi_0''(\alpha) = 12(1-2\alpha)^2 + 68 > 0.$$

Проверим знак вручную: $\varphi_0'(0) = -20$, $\varphi_0'(1) = 52$. Первая середина $1/2$ даёт производную 16, вторая $1/4$ — значение $-1{,}25$, третья $3/8$ — значение $7{,}46875$. Следовательно, после этих проб корень находится между $1/4$ и $3/8$.

Продолжая деление, получаем

$$\alpha_0 \approx 0{,}267657087, \qquad \mathbf{x}^1 \approx (0{,}464685826; -0{,}070628349),$$

$$f(\mathbf{x}^1) \approx 0{,}129599942.$$

Если вместо точного поиска минимизировать квадратичную модель в начальной точке, то $H(1,1) = 4I$ даст шаг $1/4$. Он уменьшит функцию, но не совпадёт с минимумом нелинейной φ_0. Это показывает границы применения квадратичной формулы.

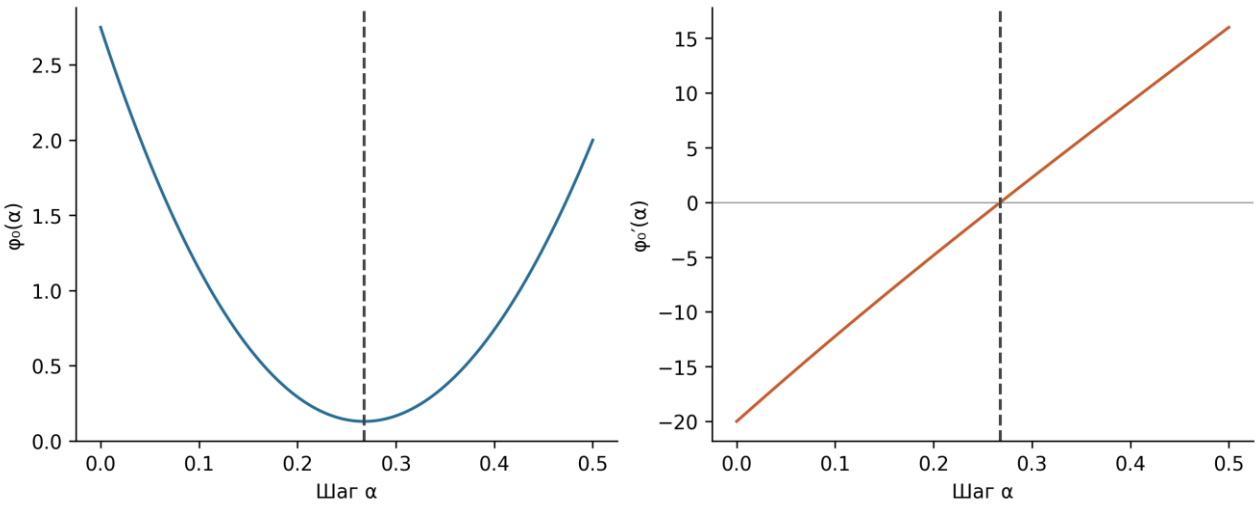


Рисунок 4 — Минимум функции на луче совпадает с нулём её производной

9.2 Два уровня точности

Внешний критерий $\| \mathbf{g}_k \|_2 \le \varepsilon_g$ отвечает за близость к стационарности. Внутренний критерий определяет точность шага. В программе принимается условие

$$|\varphi_k'(\alpha)| \le \eta \| \mathbf{g}_k \|_2^2, \qquad 0 < \eta < 1.$$

По умолчанию $\varepsilon_g = 10^{-6}$, $\eta = 10^{-8}$. Для квадратичной функции $\varphi_k'(\alpha) = s_k(\alpha - \alpha_k^*)$, где $s_k = \mathbf{g}_k^{\top} A \mathbf{g}_k$. Поэтому условие означает

$$|\alpha - \alpha_k^*| \le \eta \alpha_k^*.$$

Из того же критерия следует $\left|\mathbf{g}_{k+1}^{\top} \mathbf{g}_k\right| \le \eta \| \mathbf{g}_k \|_2^2$, однако это **не** означает $\rho_k \le \eta$: в знаменателе ρ_k присутствует норма нового градиента, которая может быть намного меньше старой.

Слишком строгий внутренний допуск увеличивает число проб. Вблизи минимума округление координат и вычитание близких чисел могут помешать его выполнению. Поэтому программа различает достижение внешней точности, исчерпание лимита и остановку из-за невозможности дальнейшего деления интервала. Последние два случая нельзя выдавать за найденный минимум.

10 Сравнение алгоритмов по точности и затратам

Для основной и вытянутой квадратичных задач используем прежние старты $(3;0)$ и $(2;1)$. Сравним постоянные шаги $1/L$, $2/(m+L)$, точную формулу и деление интервала для поиска корня производной. Везде внешний допуск равен 10^{-6}, внутренний допуск численного поиска — 10^{-8}.

Задача	Шаг	K	N_f	N_g	N_{Ag}
Основная	$1/L$	35	36	36	0
Основная	$2/(m+L)$	24	25	25	0
Основная	Точная формула	8	9	9	8
Основная	Численный поиск	8	9	217	0
Вытянутая	$1/L$	373	374	374	0
Вытянутая	$2/(m+L)$	222	223	223	0
Вытянутая	Точная формула	17	18	18	17
Вытянутая	Численный поиск	17	18	477	0

Здесь K — число внешних переходов, N_f — число вычислений функции, N_g — число вычислений градиента, N_{Ag} — число дополнительных произведений $A\mathbf{g}$ для точной формулы шага. Начальные значения включены. В численном поиске учитываются все пробные градиенты; градиент принятой точки используется повторно.

Вычисление собственных значений, учебных ошибок и построение графиков в эти счётчики не входят. Для постоянных шагов спектр заранее известен. При сравнении общего времени подготовки и решения стоимость получения этого спектра также нужно учитывать.

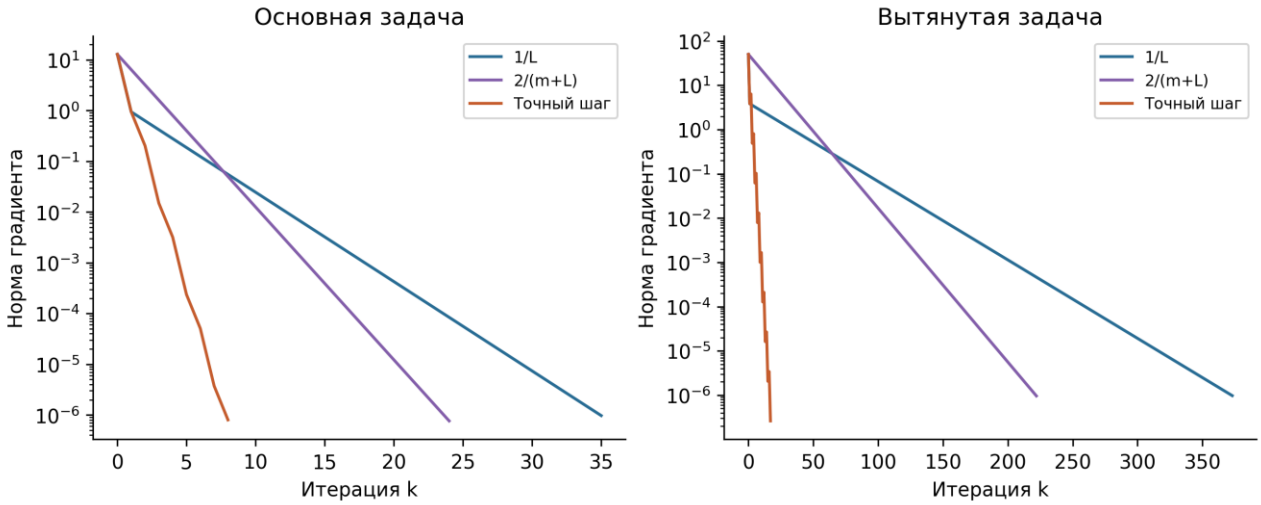


Рисунок 5 — Норма градиента при постоянном и точном выборе шага

Для основной задачи точный шаг сократил число переходов с 24 для оптимального постоянного шага до 8. Однако поиск того же шага через многократные вычисления градиента

оказался значительно дороже по N_g. В конкретном приложении один градиент может стоить существенно больше одного значения функции; простое число итераций этого не отражает.

Результаты относятся к данным задачам и стартам. В худшем примере раздела 8 точный шаг постоянно равен $2/(m + L)$, поэтому обе траектории совпадают. Точная одномерная минимизация не гарантирует универсального выигрыша по общему числу вычислений.

11 Программная реализация на Python

Архив содержит steepest_descent.py, variants.json и README.txt. Требуются Python 3.10 или новее, NumPy и Matplotlib. Распакуйте файлы в одну папку, откройте в ней терминал и выполните:

```
python -m pip install numpy matplotlib
python steepest_descent.py
python steepest_descent.py --example ill --output results_ill
python steepest_descent.py --example nonlinear --output results_nonlinear
python steepest_descent.py --variant 7 --output results_7
```

В Windows вместо python можно использовать py. По умолчанию программа сравнивает четыре способа выбора шага. Для нелинейного примера используется только численный поиск. Отдельные запуски:

```
python steepest_descent.py --method exact --output results_exact
python steepest_descent.py --method bisect --eta 1e-4 --output results_eta4
```

Основной переход для квадратичной задачи после проверки нормы градиента:

```
g = A @ (x - center)
Ag = A @ g
alpha = float(g @ g) / float(g @ Ag)
candidate = x - alpha * g
```

center — известный центр учебной квадратичной функции. Обе координаты candidate вычисляются по старому вектору x. Перед делением нужно проверить, что градиент ненулевой и матрица положительно определена. Полная программа выполняет эти проверки через проверку задачи и внешний критерий остановки.

В численном поиске проверяется производная на текущем луче:

```
candidate = x - alpha * g
g_trial = grad(candidate)
derivative = -float(g_trial @ g)
accepted = abs(derivative) <= eta * float(g @ g)
```

Вектор g здесь не меняется в ходе поиска, а g_trial пересчитывается для каждой пробы. После принятия шага g_trial становится градиентом новой внешней итерации.

Выходные файлы. Таблицы с окончанием history.csv содержат принятые точки, шаги, ошибки, нормы и затраты. Файл bisect_trials.csv содержит пробы производной на каждом луче. summary.json хранит итоговые статусы, comparison.png — графики. Повторный запуск в ту же папку перезаписывает одноимённые файлы, поэтому разным опытам удобно задавать разные папки.

Поля журнала. В строке $k > 0$ alpha и orthogonality относятся к переходу из $k - 1$ в k. Поле gap для квадратичной задачи вычисляется как $\mathbf{e}^{\mathrm{T}} A\mathbf{e}/2$ без вычитания близких значений $f - f^*$. Известный минимум используется только для учебной проверки; внешний критерий основан на градиенте.

Статусы. gradient_tolerance означает выполнение заданного критерия. iteration_limit означает исчерпание внешнего лимита. stalled означает совпадение новой и старой точки в машинной

арифметике. bracket_failed означает, что не найден интервал смены знака. line_search_limit и line_search_stalled относятся к ограничению числа проб и невозможности дальше разделить интервал. nonfinite сообщает о бесконечности или NaN. Полный список и пояснения приведены в README.txt.

12 Самостоятельная работа

Продолжаем семейство задач из лекций 10–13:

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

Начальная точка $\mathbf{x}^0 = (s + 2; t + 1)$. Все варианты имеют положительно определённый Гессиан, единственный минимум $(s; t)$ и минимальное значение d.

№	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
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. Найдите градиент, Гессиан, собственные значения m, L и число обусловленности κ.
2. Запишите $\varphi_0(\alpha)$ и её производную. Выведите точный первый шаг, указав положительность второй производной.
3. Вручную выполните два перехода. В каждом переходе покажите $\mathbf{g}_k$, $A\mathbf{g}_k$, числитель и знаменатель шага, новую точку и значение функции.

4. Проверьте ортогональность соседних градиентов и принадлежность шагов интервалу $[1/L, 1/m]$.
5. Запустите сравнение четырёх стратегий при внешнем допуске 10^{-6}. Составьте таблицу K, N_f, N_g, N_{Ag}, ошибок и итоговых статусов.
6. Сравните точный и численный шаги на первых пяти переходах. Для численного поиска повторите расчёт с $\eta = 10^{-4}$ и $\eta = 10^{-8}$; объясните различия затрат и ортогональности.
7. Постройте траектории на линиях уровня и график $f_k - f^*$ в логарифмическом масштабе. Проверьте оценку $f_{k+1} - f^* \le q^2(f_k - f^*)$ для точной формулы с учётом округления.
8. Для дополнительного опыта используйте нелинейный пример: вручную выполните первые три проверки середины интервала и затем сравните с программным шагом. Укажите, почему постоянная квадратичная формула для него неприменима.

Содержание отчёта: постановка своего варианта, формулы, две ручные итерации, проверки, таблица программных результатов, графики и вывод о влиянии выбора шага. Отдельно объясните различие внешней и внутренней точности. Число итераций без статуса и достигнутой ошибки не является достаточным результатом.

12.1 Формулы для самопроверки

Положим $u = x_1 - s$, $v = x_2 - t$. Тогда

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 2au + 2bv \\ 2bu + 2cv \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} 2a & 2b \\ 2b & 2c \end{pmatrix}.$$

Крайние собственные значения равны

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

В начальной точке

$$\mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} 4a + 2b \\ 4b + 2c \end{pmatrix}, \qquad f_0 = 4a + 4b + c + d.$$

Если обозначить компоненты градиента через g_1, g_2, шаг вычисляется по формуле

$$\alpha = \frac{g_1^2 + g_2^2}{2ag_1^2 + 4bg_1g_2 + 2cg_2^2}.$$

После перехода $u^+ = u - \alpha g_1$, $v^+ = v - \alpha g_2$. Для проверки уменьшения используйте

$$f - f^+ = \frac{(g_1^2 + g_2^2)^2}{2(2ag_1^2 + 4bg_1g_2 + 2cg_2^2)}.$$

При $0 < q < 1$ для гарантированного уменьшения ошибки значения в $1/\delta$ раз, где $0 < \delta < 1$, достаточно

$$k \ge \frac{\ln\delta}{2\ln q}.$$

Правую часть округляют вверх до целого. Эта оценка относится к ошибке значения функции; для энергетической нормы множитель 2 в знаменателе отсутствует.

13 Контрольные вопросы и задачи

1. Почему антиградиент задаёт наискорейшее локальное убывание в евклидовой норме?

2. Как связаны параметры шага при нормированном и ненормированном направлениях?
3. Что фиксируется и что изменяется во время одномерного поиска?
4. При каких условиях минимум на луче существует и единственен?
5. Как вывести ортогональность соседних градиентов? Почему она не означает ортогональность всех направлений?
6. Как получить формулу точного шага для положительно определённой квадратичной функции?
7. Почему шаг может быть больше $2/L$ и при этом уменьшать функцию?
8. Обязана ли норма градиента убывать на каждом шаге? Приведите контрпример.
9. Как число обусловленности влияет на гарантированную скорость сходимости?
10. Чем различаются внешний допуск ε_g и внутренний допуск η?
11. Почему точная минимизация вдоль луча может оказаться дороже постоянного шага?
12. Почему формула с текущим Гессианом не всегда даёт точный шаг для нелинейной функции?

Задача 1. Для $f(x,y) = (x^2 + 9y^2)/2$ из $(1;1)$ выполните один точный переход и проверьте ортогональность.

Решение. Градиент $(1;9)$, $A\mathbf{g} = (1;81)$, поэтому $\alpha_0 = 82/730 = 41/365$. Новая точка равна $(324/365; -4/365)$, новый градиент $(324/365; -36/365)$. Скалярное произведение с прежним градиентом равно $324/365 - 324/365 = 0$.

Задача 2. В той же задаче начальная точка $(1;0)$. Сколько точных переходов требуется?

Ответ. Один переход: градиент $(1;0)$ направлен вдоль собственного вектора с собственным значением 1, шаг равен 1 и новая точка равна минимуму $(0;0)$.

Задача 3. При $\kappa = 9$ во сколько раз гарантированно уменьшается ошибка значения за один переход? Сколько переходов достаточно для её уменьшения в 100 раз?

Решение. $q = (9-1)/(9+1) = 0{,}8$, поэтому ошибка после перехода не превышает 0,64 прежней. Требуется $k \geq \ln(0{,}01)/(2\ln 0{,}8) \approx 10{,}32$, то есть достаточно 11 переходов.

Задача 4. Численный поиск достиг $|\varphi_k{}'(\alpha)| \leq 10^{-4} \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2^2$. Можно ли утверждать $\rho_k \leq 10^{-4}$?

Ответ. В общем случае нельзя. Из условия следует $\rho_k \leq 10^{-4} \parallel \mathbf{g}_k \parallel_2 / \parallel \mathbf{g}_{k+1} \parallel_2$ при ненулевых градиентах. Если новая норма в 100 раз меньше старой, полученная граница равна 10^{-2}.

14 Литература

[1] Kochenderfer M. J., Wheeler T. A. Algorithms for Optimization. Cambridge, MA: MIT Press, 2019. Chapter 4, § 4.2, pp. 54–55: одномерный поиск вдоль направления; chapter 5, § 5.1, pp. 69–71: градиентное направление, ортогональность и зигзагообразные траектории. Ручные примеры, вывод квадратичной оценки и программа в этой лекции подготовлены для данного учебного курса.

[2] Рабочая программа дисциплины «Методы оптимизации», 2024. Образовательная программа 6B06103 «Математическое и компьютерное моделирование». Тема 14 «Методы многомерной оптимизации. Метод наискорейшего спуска».

[3] Учебные материалы дисциплины «Методы оптимизации». Лекция 12 «Классический метод минимизации и основы методов спуска» и лекция 13 «Градиентный метод»: лемма о спуске, сильная выпуклость, постоянный шаг и спектральный анализ. В настоящей лекции прежние задачи используются для сопоставления стратегий выбора шага.