

Metody numeryczne

13. Minimalizacja: funkcje wielu zmiennych

Metoda Levenberga-Marquardta

Precyzyjna lokalizacja minimum

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

20 stycznia 2026

Wykład zaczniemy od metody Levenberga-Marquardta, która formalnie stosuje się, gdy jesteśmy daleko od minimum, ale dostarcza kryterium, co to znaczy być blisko minimum.

Przypominam: Gdy jesteśmy daleko od minimum funkcji wielu zmiennych, **nie minimalizujemy**, tylko podążamy w stronę malejących wartości funkcji.

Zastosowanie metody Newtona

Formalnie znalezienie minimum funkcji wielu zmiennych jest równoważne z rozwiązaniem równania

$$\nabla f = 0 \quad (1)$$

Można spróbować rozwiązywać to równanie za pomocą wielowymiarowej metody Newtona. W kroku Newtonowskim pojawiłaby się macierz pochodnych cząstkowych wektora ∇f ; jest to oczywiście hessjan, czyli macierz *drugich* pochodnych cząstkowych funkcji f :

$$\mathbf{H}_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i, j = 1, \dots, N \quad (2)$$

Ostatecznie metoda Newtona miałaby postać

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k) \nabla f|_{\mathbf{x}_k} \quad (3)$$

Tak hessjan, jak i gradient należy wyliczać w bieżącym punkcie \mathbf{x}_k .

Problemy z metodą Newtona

Metoda Newtona w postaci (3) nastrocza kilka problemów:

- Dla $N \gg 1$ zastosowanie metody Newtona jest **monstrualnie** kosztowne
- Nawet dla N rzędu kilku-kilkunastu, wielokrotne wyliczanie pochodnych cząstkowych, a następnie rozwiązywanie układu równań $\mathbf{H}\mathbf{z} = -\nabla f$, może być drogie i uciążliwe
- Jeżeli minimalizowana funkcja **nie** jest formą kwadratową (a na ogół nie jest!), krok Newtonowski może być zbyt długi; metoda może wtedy “przestrzelić” nad poszukiwanym minimum
- **Warunkiem koniecznym** na to, aby iteracja (3) prowadziła do zmniejszania się wartości funkcji, jest symetria i **dodatnia określoność** wszystkich napotykanym po drodze hessjanów. Istotnie, aby po wykonaniu

kroku Newtonowskiego minimalizowana funkcja malała, musi zachodzić

$$(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)^T \nabla f|_{\mathbf{x}_k} < 0 \quad (4a)$$

— iloczyn skalarny gradientu funkcji i przesunięcia, czyli rzut przesunięcia na gradient, jest ujemny, co oznacza, że przesunięcie zostało wykonane w kierunku *malejących* wartości funkcji. Po formalnym rozwiązaniu (3) ze względu na $\nabla f|_{\mathbf{x}_k}$ i wstawieniu wyniku do powyższego równania, daje to

$$-(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)^T \mathbf{H}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) < 0 \quad (4b)$$

co jest spełnione, jeżeli \mathbf{H} jest dodatnio określone.

Dodatnia określoność hessjanu

Możemy bezpiecznie założyć, że jeśli minimalizowana funkcja jest dostatecznie gładka, hessjan jest w każdym punkcie symetryczny. Niestety, nie można tego założyć odnośnie do dodatniej określoności.

W minimum hessjan jest dodatnio określony. Na podstawie ciągłości drugich pochodnych wnioskujemy, że musi istnieć pewne **otoczenie minimum, w którym hessjan jest dodatnio określony**. Jednak daleko od minimum hessjan dodatnio określony być nie musi. Możemy traktować **dodatnią określoność hessjanu** jako matematyczny warunek tego, że jesteśmy **blisko minimum**.

Metoda Levenberga-Marquardta

Daleko od minimum stosowanie metody najszybszego spadku ma sens. Jak jednak zobaczymy, metoda ta nie najlepiej nadaje się do precyzyjnego określenia położenia minimum. Chcielibyśmy skonstruować kryterium pozwalające stwierdzić, czy jesteśmy już na tyle blisko minimum, że warto/można przełączyć się na metody bardziej precyzyjne, jeśli zachodzi taka potrzeba.

Metodą taką jest metoda Levenberga-Marquardta. **Zaleca** się jest stosowanie, gdy

- wymiarowość problemu nie jest bardzo duża, $N \sim 100$ co najwyżej
- obliczanie drugich pochodnych jest możliwe i nie jest zbyt uciążliwe
- gdy koszt obliczania drugich pochodnych **nie** jest wielki ze względu na strukturę problemu (jak w Big Data, gdzie wymiarowość problemu

— liczba dopasowywanych parametrów — może być niewielka, ale minimalizowana funkcja jest sumą **BARDZO** wielu składników).

Metoda Levenberga-Marquardta wywodzi się z metody Newtona. Daleko od minimum hessjan nie musi być nawet dodatnio określony, co powoduje, iż krok newtonowski wcale nie musi prowadzić do spadku wartości funkcji (por. (4b)). My jednak chcemy aby wartość funkcji w kolejnych krokach spadała. Zmodyfikujmy więc hessjan:

$$\widetilde{\mathbf{H}}_{ii} = (1 + \lambda) \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}, \quad (5a)$$

$$\widetilde{\mathbf{H}}_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i \neq j, \quad (5b)$$

przy czym $\lambda \geq 0$.

Zauważmy, że zachodzi jedna z dwu możliwych sytuacji: (i) jeśli znajdujemy się w basenie atrakcji minimum, wówczas dla odpowiednio dużego λ macierz (5) stanie się dodatnio określona lub też (ii) jeśli dla żadnego dodatniego λ macierz (5) nie staje się dodatnio określona, oznacza to, że znajdujemy się na monotonicznej gałęzi funkcji, poza basenem atrakcji minimum.

Rozpoczynamy z jakimś niewielkim λ , na przykład $\lambda = \lambda_0 = 2^{-10} = 1/1024$. Przypuśćmy, iż aktualnym przybliżeniem minimum jest punkt \mathbf{x}_k . Dostajemy zatem...

Algorytm Levenberga-Marquardta

1. Oblicz $\nabla f|_{\mathbf{x}_k}$.
2. Oblicz $\widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}_k)$.
3. Oblicz

$$\mathbf{x}_{\text{test}} = \mathbf{x}_k - \widetilde{\mathbf{H}}^{-1}(\mathbf{x}_k) \nabla f|_{\mathbf{x}_k} . \quad (6)$$

4. Jeżeli $f(\mathbf{x}_{\text{test}}) > f(\mathbf{x}_k)$, to
 - (a) $\lambda \rightarrow 8\lambda$ (można też powiększać o inny znaczny czynnik).
 - (b) Idź do punktu 2.
5. Jeżeli $f(\mathbf{x}_{\text{test}}) < f(\mathbf{x}_k)$, to
 - (a) $\lambda \rightarrow \lambda/8$ (można też zmniejszać o inny znaczny czynnik).
 - (b) $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{\text{test}}$.
 - (c) Idź do punktu 1.

Komentarz

Daleko od minimum *nie minimalizujemy* (nie poszukujemy minimów kierunkowych), a jedynie *podążamy w kierunku malejących wartości funkcji*.

Dodatkowo, jeśli $\lambda > \lambda_{\max} \gg 1$, uznajemy, iż znajdujemy się poza basenem atrakcji minimum i algorytm zawodzi. Jeśli natomiast $\lambda < \lambda_{\min} \ll 1$, macierz $\widetilde{\mathbf{H}}$ jest w praktyce równa hessjanowi, który jest dodatnio określony, o czym z kolei świadczy fakt, że uzyskujemy malejące wartości funkcji f . Modyfikacja (5) przestaje być potrzebna, możemy za to przerzucić się na metody właściwe dla bliskich okolic minimum.

Ponadto w celu przyspieszenia obliczeń, jeżeli $f(\mathbf{x}_{\text{test}}) < f(\mathbf{x}_k)$, możemy *chwilowo* zrezygnować ze zmniejszania λ i modyfikowania $\widetilde{\mathbf{H}}$ i przeprowadzić kilka kroków z tą samą macierzą, a więc korzystając z tej samej faktoryzacji.

Zauważmy, iż przypadek $\lambda \gg 1$ oznacza, iż jesteśmy daleko od minimum. Z drugiej strony jeśli $\lambda \gg 1$, macierz $\widetilde{\mathbf{H}}$ staje się w praktyce diagonalna, a zatem

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{\text{test}} &\simeq \mathbf{x}_k - (1 + \lambda)^{-1} \text{diag} \left\{ \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \right)^{-1}, \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \right)^{-1}, \dots, \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_N^2} \right)^{-1} \right\} \nabla f|_{\mathbf{x}_k} \\ &\simeq \mathbf{x}_i - \text{const} \cdot \nabla f|_{\mathbf{x}_k}, \end{aligned} \quad (7)$$

o ile drugie pochodne cząstkowe w poszczególnych kierunkach nie różnią się znacznie od siebie. Widać, iż daleko od minimum, gdzie warunek zachowujący raz osiągnięte minima kierunkowe nie zachodzi, algorytm Levenberga-Marquardta zachowuje się prawie jak metoda najszybszego spadku.

Strategia precyzyjnej minimalizacji wielowymiarowej

Jeżeli jesteśmy dostatecznie blisko minimum — co stwierdzamy albo na podstawie dodatniej określoności hessjanu, albo wiedząc, że krajobraz daleko od minimum (minimów) ma “strukturę lejka” (*funnel structure*), to znaczy dla dużych wartości argumentów funkcja szybko maleje i ryzyko rozbieżności jest niewielkie — można, a niekiedy wręcz trzeba, zastosować metody, które pozwolą na bardziej precyzyjną, a przy tym możliwie szybką lokalizację minimum. Metody te wykorzystują poznane już metody minimalizowania funkcji jednej zmiennej. Przedstawimy strategię poszukiwania (lokalnego) minimum tej funkcji w postaci [ciągu minimalizacji jednowymiarowych](#).

1. Aktualnym przybliżeniem minimum jest punkt \mathbf{x}_k .
2. Wybieramy pewien kierunek poszukiwań \mathbf{p}_k .
3. Konstruujemy funkcję $g_k: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$g_k(\alpha) = f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k). \quad (8)$$

Zauważmy, że funkcja $g_k(\alpha)$ **jest funkcją jednej zmiennej**. Geometrycznie jest to “ślad” $N+1$ -wymiarowego wykresu funkcji $f(\mathbf{x})$ przeciętego płaszczyzną zawierającą punkt \mathbf{x}_k i wektor \mathbf{p}_k .

4. Znanymi metodami jednowymiarowymi znajdujemy α_{\min} takie, że funkcja (8) osiąga minimum. Jest to **minimum kierunkowe** funkcji f .
- 5.

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_{\min} \mathbf{p}_k. \quad (9)$$

6. *goto* 1.

Przykład

Niech $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x_1, x_2) = 2.5x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 - x_1 - x_2$. Przypuśćmy, że dany jest punkt $\mathbf{x}_k = (1, 2)$ oraz kierunek poszukiwań $\mathbf{p}_k = [-1, 1]^T$. Wówczas

$$\begin{aligned} g_k(\alpha) &= f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k) \\ &= 2.5(1 - \alpha)^2 + (1 - \alpha)(2 + \alpha) + (2 + \alpha)^2 - (1 - \alpha) - (2 + \alpha) \\ &= 2.5\alpha^2 - 2\alpha + 5.5 \end{aligned} \quad (10)$$

Jest to funkcja jednej zmiennej, α . Osiąga ona minimum dla $\alpha = \frac{2}{5}$. Zatem *następnym* punktem będzie

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{2}{5}\mathbf{p}_k = \left(1 - \frac{2}{5}, 2 + \frac{2}{5}\right) = (0.6, 2.4) \quad (11)$$

Wystarczy teraz wybrać kolejny kierunek poszukiwań \mathbf{p}_{k+1} etc.

Jak wybierać kierunki poszukiwań?

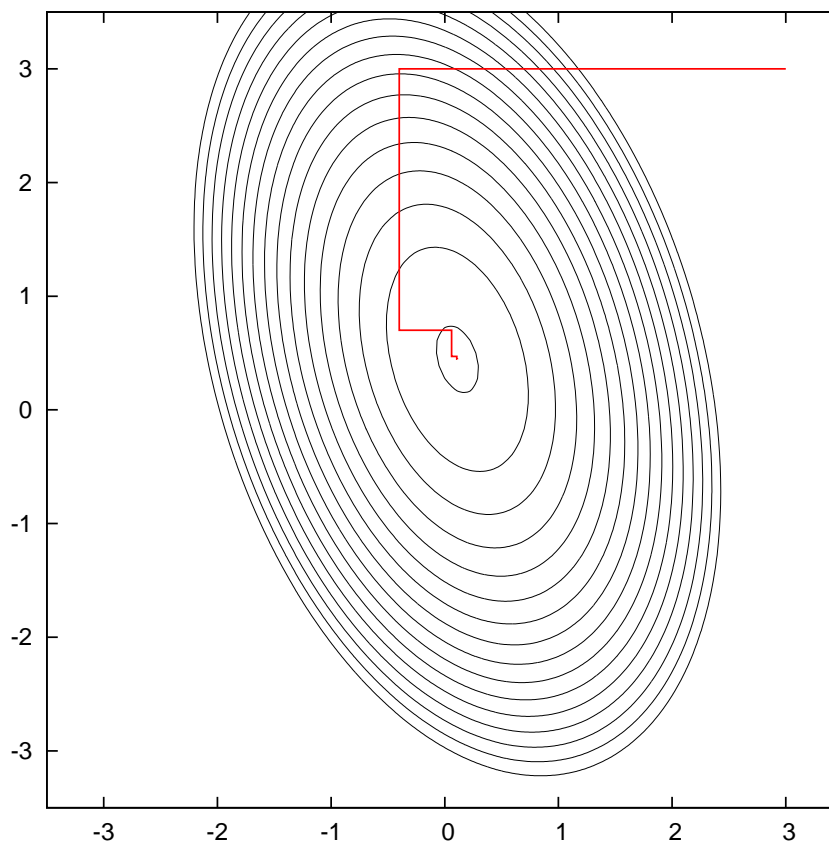
Cały problem sprowadza się zatem do wyboru odpowiedniej sekwencji kolejnych kierunków $\{p_k\}$.

Następujące strategie wyboru kierunków poszukiwań są bardzo popularne:

- Minimalizacji po współrzędnych — kolejnymi kierunkami poszukiwań są kierunki równoległe do kolejnych osi układu współrzędnych.
- *Metoda najszybszego spadku*, w której kierunek poszukiwań pokrywa się z minus gradientem minimalizowanej funkcji w aktualnym punkcie.

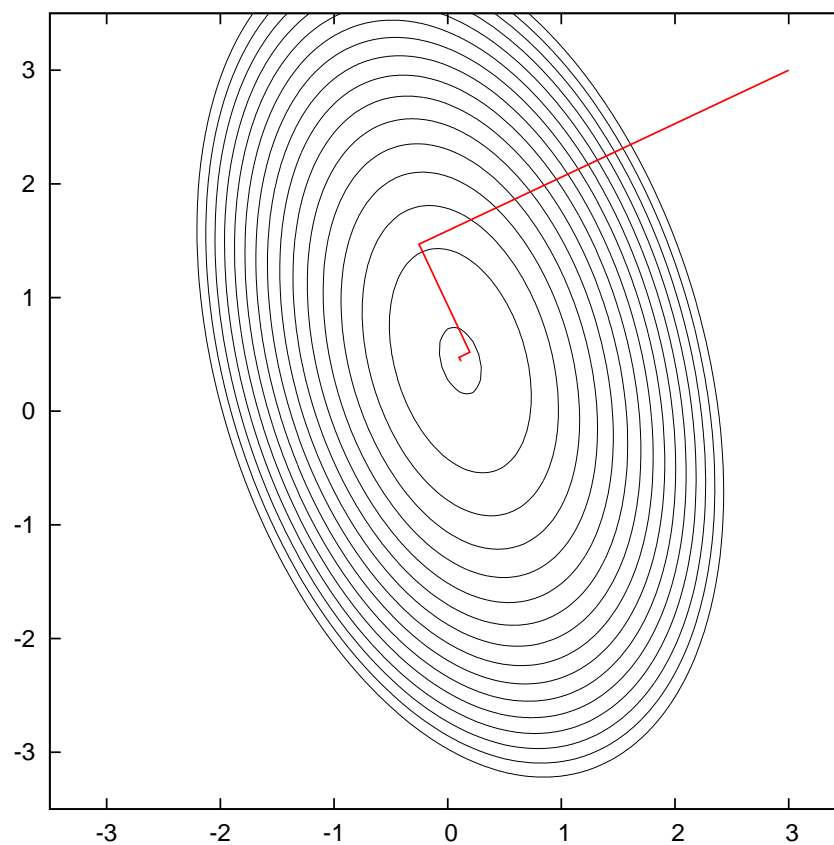
Okazuje się, że jeśli jesteśmy blisko minimum, nie są to dobre pomysły, gdyż prowadzą do wielu drobnych kroków, które częściowo likwidują efekty osiągnięte w krokach poprzednich. Dlaczego?

Przykład — minimalizacja po współrzędnych



Dużo małych kroków. Osie układu nijak się mają do “naturalnej” geometrii minimalizowanej funkcji.

Przykład — metoda najszybszego spadku

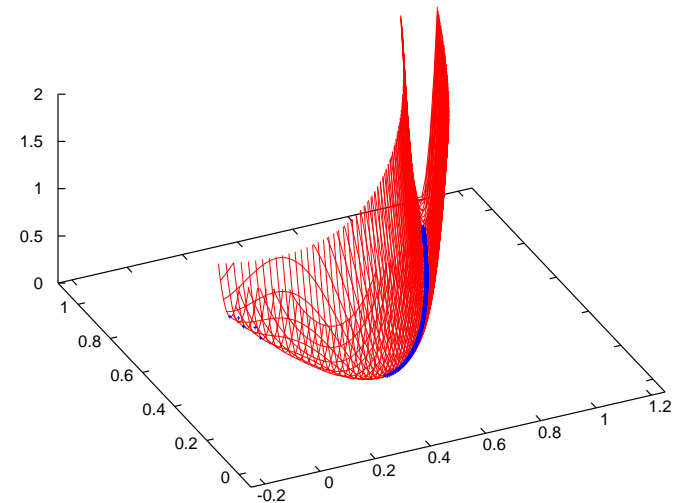
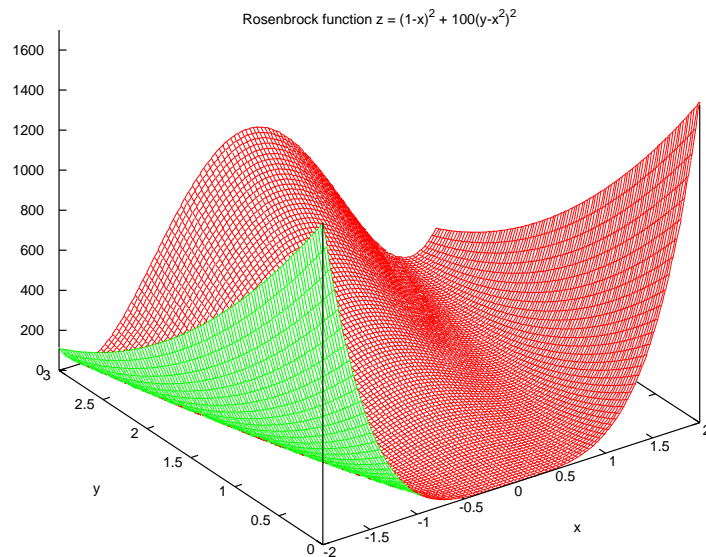


Wygląda lepiej, ale kroków prawie tyle samo

W metodzie najszybszego spadku co prawda realizujemy najważniejszy pomysł na minimalizację — **zawsze podążamy w kierunku malejących wartości** (czyli kierunkiem poszukiwań jest **minus gradient funkcji w aktualnym punkcie**) — ale czasami poszukiwanie minimów kierunkowych bywa niepotrzebnie kosztowne. W dodatku, jeśli jesteśmy już blisko minimum, okazuje się, że metoda najszybszego spadku także prowadzi do konieczności wykonywania wielu małych kroków, które częściowo niwelują efekty osiągnięte w krokach poprzednich.

Przy precyzyjnej lokalizacji minimum, **główny**, największy koszt obliczeniowy ponosimy wykonując wiele drobnych kroków końcowych, już w bezpośrednim sąsiedztwie minimum. Gdyby udało nam się zredukować liczbę tych kroków, odnieśliśmyby znaczny zysk na kosztach obliczeniowych.

Funkcja Rosenbrocka



Funkcja Rosenbrocka $f(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2$ jest przykładem funkcji, którą trudno zminimalizować. W klasycznym zadaniu minimalizuje się tę funkcję startując z punktu $(-3, -4)$. Wartość funkcji w tym punkcie wynosi 16916, zaś gradient to $[-15608, -2600]^T$, należy zatem poruszać się *w kierunku* minus gradientu, ale *o bardzo niewielki ułamek* jego długości. Prawy panel pokazuje końcowy przebieg (niezbyt udanej) minimalizacji funkcji Rosenbrocka za pomocą metody najszybszego spadku.

W pobliżu minimum

Znajdźmy warunek na to, aby f osiągała minimum kierunkowe, czyli aby g_k osiągała minimum:

$$\frac{dg_k}{d\alpha} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} (\mathbf{p}_k)_i = \left(\nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\min}} \right)^T \mathbf{p}_k = 0. \quad (12)$$

W minimum kierunkowym gradient funkcji jest prostopadły do kierunku poszukiwań. Zatem w metodzie najszybszego spadku kierunek poszukiwań (lokalny kierunek minimalizacji) co prawda zaczyna się prostopadle do poziomnic funkcji, ale kończy się *stycznie* do poziomnic. Natomiast w minimalizacji po współrzędnych kolejne kierunki poszukiwań, czyli — tutaj — kolejne współrzędne, nie zależą od kształtu minimalizowanej funkcji; taka strategia nie może być optymalna.

Przybliżenie formy kwadratowej

Przypuśćmy, że jesteśmy dostatecznie blisko minimum. Rozwijamy minimalizowaną funkcję w szereg Taylora wokół minimum i otrzymujemy

$$f(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + f_0, \quad (13)$$

gdzie \mathbf{A} jest macierzą drugich pochodnych cząstkowych (hessjanem) obliczanym w minimum. Z definicji minimum, macierz ta jest dodatnio określona, jeśli zaś funkcja jest dostatecznie gładka, macierz ta jest symetryczna. Zatem w pobliżu minimum, funkcja w przybliżeniu zachowuje się jak dodatnio określona forma kwadratowa.

Gradientsy sprzężone

W przybliżeniu (13) gradient funkcji f w punkcie \mathbf{x}_k wynosi

$$\nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k - \mathbf{b}. \quad (14)$$

Wychodząc z punktu \mathbf{x}_k , poszukujemy minimum kierunkowego w kierunku \mathbf{p}_k , patrz strona 14. Gradient funkcji w pewnym nowym punkcie $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{p}_k$ wynosi

$$\nabla f|_{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{A}\mathbf{p}_k - \mathbf{b}. \quad (15)$$

Zmiana gradientu wynosi

$$\delta(\nabla f) = \alpha\mathbf{A}\mathbf{p}_k. \quad (16)$$

Punkt \mathbf{x}_k jest minimum kierunkowym w kierunku \mathbf{p}_k , a więc gradient funkcji w tym punkcie spełnia warunek (12). *Jeżeli chcemy aby poszukiwania w nowym kierunku nie zepsuły minimum kierunkowego w kierunku \mathbf{p}_{k-1} , czyli tym, w którym poruszaliśmy się dochodząc do punktu \mathbf{x}_k , zmiana gradientu musi być prostopadła do starego kierunku poszukiwań,* $\delta (\nabla f)^T \mathbf{p}_{k-1} = 0$. Tak jednak musi być dla *wszystkich* poprzednich kierunków, nie chcemy bowiem naruszyć żadnego z poprzednich minimów kierunkowych. A zatem

$$\mathbf{p}_i^T \mathbf{A} \mathbf{p}_j = 0, \quad i > j. \quad (17)$$

Metodę wybierania kierunków poszukiwań spełniających (17) nazywamy *metodą gradientów sprzężonych*.

Jak się obejść bez hessjanu?

Z jednego z poprzednich wykładów znamy *algebraiczną* metodę gradientów sprzężonych, wydaje się zatem, iż moglibyśmy jej użyć do skonstruowania ciągu wektorów $\{\mathbf{p}_k\}$. Niestety, nie możemy, **nie znamy bowiem macierzy \mathbf{A}** , czyli hessjanu w minimum. Czy możemy się bez tego obejść?

Twierdzenie 1. *Niech f ma postać (13) i niech $\mathbf{r}_k = -\nabla f|_{\mathbf{x}_k}$. Z punktu \mathbf{x}_k idziemy w kierunku \mathbf{p}_k do punktu, w którym f osiąga minimum kierunkowe. Oznaczmy ten punkt \mathbf{x}_{k+1} . Wówczas $\mathbf{r}_{k+1} = -\nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}}$ jest **tym samym** wektorem, który zostałby skonstruowany w algebraicznej metodzie gradientów sprzężonych.*

Dowód. Na podstawie równania (14), $\mathbf{r}_k = -\mathbf{A}\mathbf{x}_k + \mathbf{b}$ oraz

$$\mathbf{r}_{k+1} = -\mathbf{A}(\mathbf{x}_k + \alpha\mathbf{p}_k) + \mathbf{b} = \mathbf{r}_k - \alpha\mathbf{A}\mathbf{p}_k. \quad (18)$$

W minimum kierunkowym $\mathbf{p}_k^T \nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}} = -\mathbf{p}_k^T \mathbf{r}_{k+1} = 0$ (por. (12)). Wobec tego mnożąc równanie (18) lewostronnie przez \mathbf{p}_k^T , otrzymujemy

$$\alpha = \frac{\mathbf{p}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A}\mathbf{p}_k}. \quad (19)$$

Ponieważ w algebraicznej metodzie gradientów sprzężonych $\mathbf{r}_k^T \mathbf{p}_k = \mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k$, otrzymujemy **dokładnie takie samo** α jak we wzorach na metodę algebraiczną, co kończy dowód. □

Algorytm gradientów sprzężonych

Rozpoczynamy w pewnym punkcie \mathbf{x}_1 . Bierzemy $\mathbf{r}_1 = \mathbf{p}_1 = -\nabla f|_{\mathbf{x}_1}$.

1. Będąc w punkcie \mathbf{x}_k , dokonujemy minimalizacji kierunkowej w kierunku \mathbf{p}_k ; osiągamy punkt \mathbf{x}_{k+1} .
2. Obliczamy $\mathbf{r}_{k+1} = -\nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}}$.
3. Obliczamy (jak w metodzie algebraicznej)

$$\beta = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}. \quad (20)$$

4. Obliczamy (jak w metodzie algebraicznej) $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta \mathbf{p}_k$.

W metodzie gradientów sprzężonych te kroki, które *wymagałyby* znajomości hessjanu w minimum, *zastępujemy* minimalizacją kierunkową, natomiast te kroki, które *nie wymagają* znajomości hessjanu, wykonujemy tak samo, jak w algebraicznej metodzie gradientów sprzężonych.

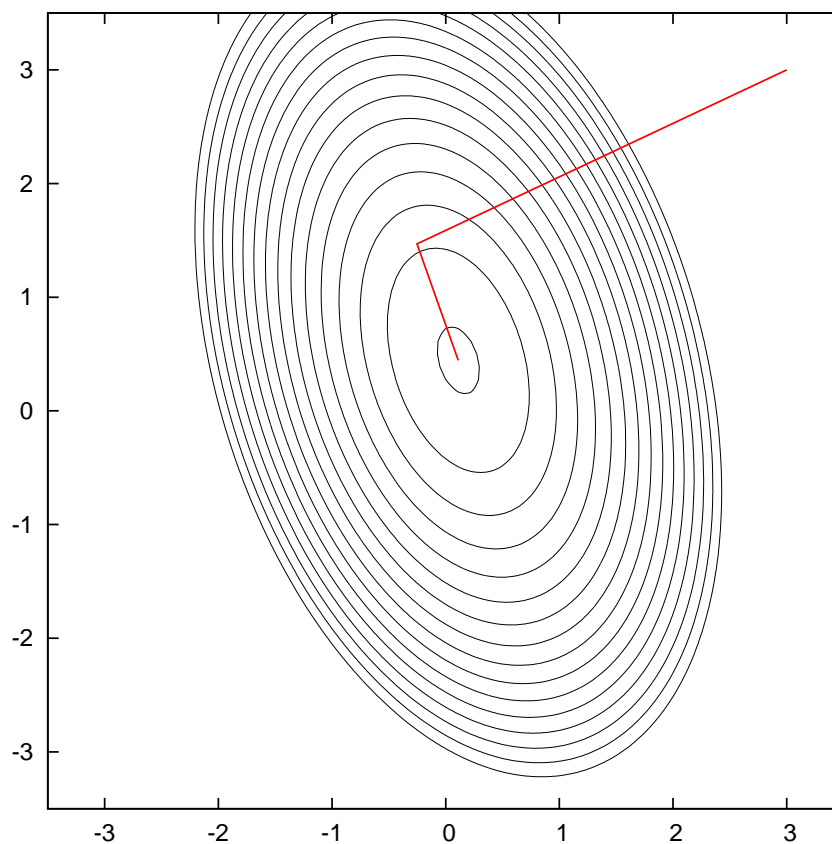
Twierdzenie ze strony 25 gwarantuje, że *formalnie* daje to to samo, co algebraiczna metoda gradientów sprzężonych.

Zamiast używać równania (20), można skorzystać z

$$\beta = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T (\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k)}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}. \quad (21)$$

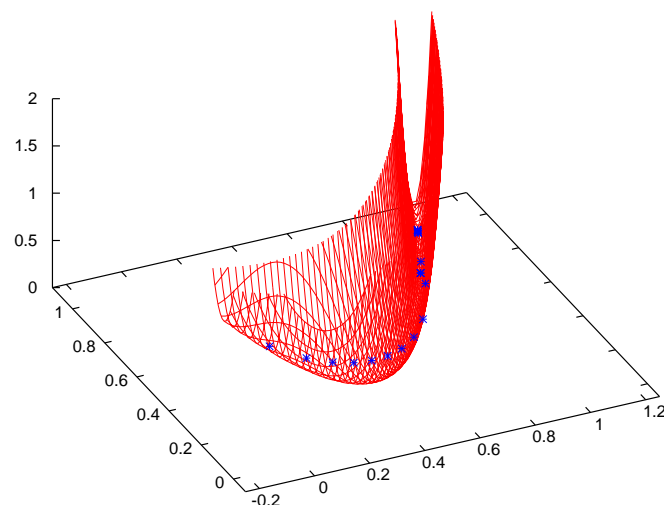
Jeżeli funkcja f ma *ściśle* postać (13), nie ma to znaczenia, gdyż $\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_k = 0$. Ponieważ jednak f jest tylko w przybliżeniu formą kwadratową, (21) może przyspieszyć obliczenia, gdy grozi stagnacja.

Przykład — metoda gradientów sprzężonych



Tylko dwa kroki! Drugi krok nie jest prostopadły do pierwszego, ale jest z nim sprzężony.

Przykład — funkcja Rosenbrocka



Zastosowanie algorytmu gradientów sprzężonych do minimalizacji funkcji Rosenbrocka. Widać *znaczne* przyspieszenie (mniej punktów pośrednich!) w stosunku do przedstawianej powyżej metody najszybszego spadku.

Uwaga o metodach gradientowych

Analizując metody gradientowe, (podświadomie) myślimy o funkcjach zachowujących się “porządnie”. W praktyce jednak często mamy do czynienia z funkcjami, których gradienty są **bardzo duże**, jeśli chodzi o normę (długość).

Powróćmy do przykładu funkcji Rosenbrocka ze strony 20. Przypuśćmy, że chcemy zminimalizować tę funkcję startując z punktu $(4, 1)$. Wartość funkcji Rosenbrocka w tym punkcie wynosi $f(4, 1) = 22\,509$, a jej pochodne cząstkowe

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(4,1)} = \left[400x^3 - 400xy + 2x - 2 \right]_{(4,1)} = 24\,006 \quad (22a)$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(4,1)} = \left[200y - 200x^2 \right]_{(4,1)} = -3\,000 \quad (22b)$$

a wobec tego minus gradient

$$\mathbf{p} = -\nabla f|_{(4,1)} = [-24\,006, 3\,000] \quad (22c)$$

Jednowymiarowa funkcja (8), którą w tym wypadku minimalizujemy, ma postać

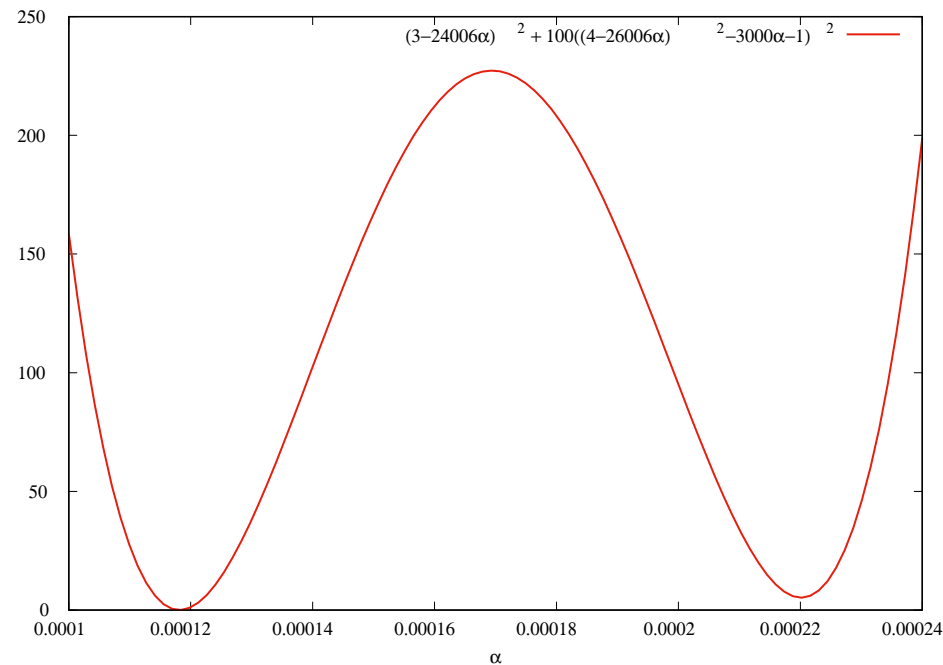
$$g(\alpha) = (3 - 24\,006\alpha)^2 + 100 \left((4 - 24\,006\alpha)^2 - 3\,000\alpha - 1 \right)^2 \quad (22d)$$

Jest to wielomian czwartego stopnia, o współczynniku wiodącym $100 \cdot (24\,006)^4 \simeq 3.321 \cdot 10^{19}$. Jej przykładowe wartości wynoszą $g(-1) \simeq 3.323 \cdot 10^{20}$, $g(0) = f(4, 1) = 22\,505$, $g(1) \simeq 3.319 \cdot 10^{20}$, a więc, aby znaleźć minimum (jedno z dwu minimów) funkcji (22d), należy poruszać się o bardzo małe ułamki gradientu (bardzo małe α).

Być może *w tym przypadku* jako kierunek poszukiwań wygodniejsze byłoby wzięcie znormalizowanego gradientu

$$\mathbf{p} = -\frac{\nabla f|_{(4,1)}}{\|\nabla f|_{(4,1)}\|} \simeq [-0.992270, 0.124003] \quad (22e)$$

ale w licznych innych przypadkach mogłoby to stanowić utrudnienie.



Funkcja (22d) ma *dwa* blisko położone minima. Z praktycznego punktu widzenia nie ma znaczenia, które z tych minimów osiągniemy w procedurze minimalizacji dwuwymiarowej funkcji Rosenbrocka.

Metoda zmiennej metryki

Powróćmy do wspomnianego na początku wykładu zastosowania metody Newtona. Jeżeli **hessjan jest dodatnio określony**, krok Newtona prowadzi do spadku wartości funkcji, moglibyśmy więc użyć metody Newtona do precyzyjnego określania położenia minimum, gdy już znajdziemy się w jego otoczeniu. Dla funkcji **nie** będących w dobrym przybliżeniu formą kwadratową (13), może to, mimo dodatniej określoności hessjanu, oznaczać konieczność wykonania *wielu* drobnych kroków w końcowej fazie minimalizacji. **Praktyczną** trudność może stanowić konieczność wielokrotnego obliczania hessjanu, jeżeli obliczanie drugich pochodnych cząstkowych jest kosztowne lub kłopotliwe, w skrajnych przypadkach wręcz niemożliwe.

W takim wypadku warto jest rozważyć skorzystanie z **metody zmiennej metryki**: Zamiast korzystać z prawdziwego hessjanu obliczanego w każdym kroku, tworzymy ciąg **dodatnio określonych przybliżeń hessjanu**. Startujemy z jakiegoś x_0 . Jako początkowe przybliżenie hessjanu \mathbf{H}_0 bierzemy jakąś sensowną macierz symetryczną, dodatnio określoną — jeśli nie mamy lepszego pomysłu, może to być macierz jednostkowa, natomiast jeśli do punktu x_0 doszliśmy korzystając z metody Levenberga-Marquarda, naturalne (i zalecane) jest przyjęcie $\mathbf{H}_0 = \tilde{\mathbf{H}}$, gdzie ta ostatnia macierz to przybliżony hessjan obliczony w ostatnim kroku metody Levenberga-Marquarda.

W metodzie Newtona mamy (3)

$$\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k = -\mathbf{H}^{-1} \nabla f|_{\mathbf{x}_k} . \quad (23)$$

$\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \sim \mathbf{p}_k$. Jednak w metodzie Newtona przesuwamy się o z góry ustaloną (pod)wielokrotność wektora \mathbf{p}_k , a w metodzie zmiennej metryki optymalizujemy długość przesunięcia, aby w każdym kroku osiągać minimum kierunkowe.

A zatem, startując z jakiegoś \mathbf{x}_1 , wykonujemy iterację:

1. Rozwiązujemy równanie $\mathbf{H}_k \mathbf{p}_k = -\nabla f|_{\mathbf{x}_k}$.
2. Przeprowadzamy minimalizację kierunkową funkcji jednowymiarowej $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$. Niech minimum kierunkowemu odpowiada wartość α_k .
3. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$.
4. Wyliczamy $\mathbf{y}_k = \nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}} - \nabla f|_{\mathbf{x}_k}$.
5. Wyliczamy nowe przybliżenie \mathbf{H}_{k+1} , *na przykład* za pomocą formuły BFGS:

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T}{\alpha_k \mathbf{p}_k^T \mathbf{y}_k} - \frac{\nabla f|_{\mathbf{x}_k} (\nabla f|_{\mathbf{x}_k})^T}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{H}_k \mathbf{p}_k}. \quad (24)$$

Kończymy gdy $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \varepsilon_1$ lub gdy $\|\nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}}\| < \varepsilon_2$, gdzie $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ są zadanymi tolerancjami.

Własności metody zmiennej metryki

Można pokazać, że jeżeli \mathbf{H}_0 jest symetryczna i dodatnio określona, także następne \mathbf{H}_k mają te własności.

Dodatkowo, jeśli f jest formą kwadratową (13), $\mathbf{H}_{i \geq N+1} \equiv \mathbf{H}_{\min}$ w arytmetyce dokładnej. W ogólności ciąg \mathbf{H}_k *nie musi* być zbieżny do “prawdziwego” hessjanu, nawet jeśli metoda daje zadowalające numerycznie przybliżenie minimum.

W pewnym uproszczeniu można powiedzieć, że metoda zmiennej metryki ma się do metody gradientów sprzężonych tak, jak metoda Broydena ma się do wielowymiarowej metody Newtona (litera “B” w akronimie BFGS oznacza właśnie Broydena).

Metoda Powella

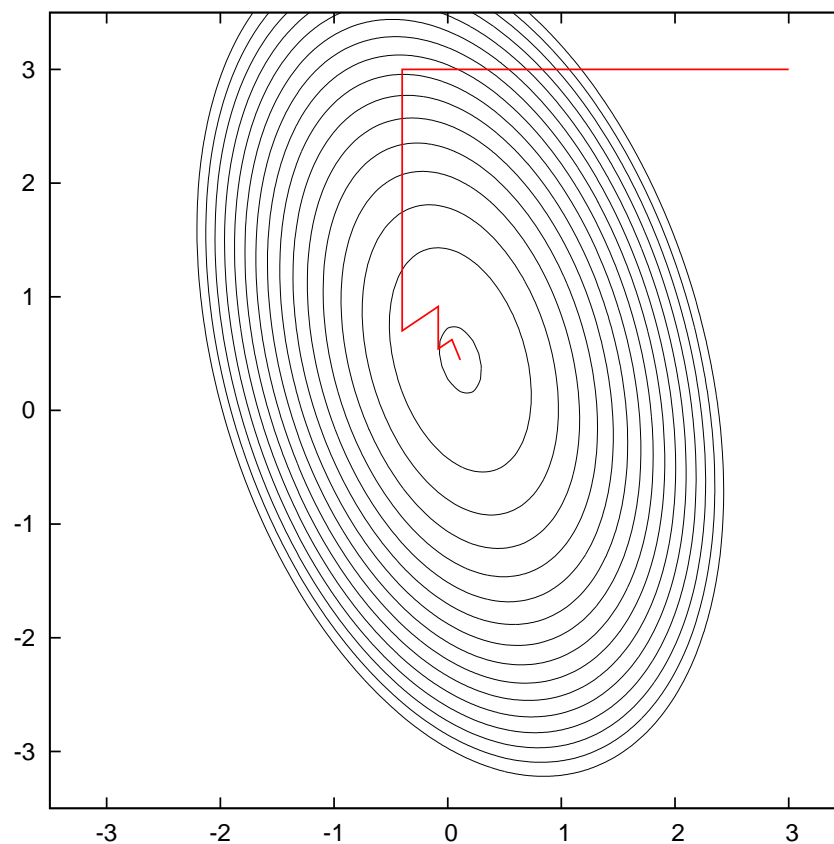
Wszystkie omówione wyżej metody wymagały obliczania pochodnych (gradientu) funkcji $f(\mathbf{x})$. Co jednak zrobić, jeśli obliczenie pochodnych jest kosztowne, niemożliwe lub funkcja jest nieróżniczkowalna? Zasadnicza strategia postępowania — minimalizacja kierunkowa, wybór nowego kierunku etc — pozostaje w mocy, zmienia się tylko sposób wyboru kolejnych kierunków. Metoda Powella polega na konstrukcji kierunków, które z czasem, po wielu iteracjach, stają się sprzężone.

Inicjalizujemy biorąc $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^N = \{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^N$, gdzie $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^N$ są kolejnymi wektorami (innymi słowy, zaczynamy od minimalizacji po współrzędnych). Następnie

1. Znajdujemy się w pewnym punkcie \mathbf{X}_0 .
2. Minimalizujemy wzdłuż kolejnych kierunków \mathbf{p}_i , osiągając kolejno punkty \mathbf{X}_i .
3. Dla $i = 1, \dots, N - 1$: $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{i+1}$.
4. $\mathbf{p}_N = \mathbf{X}_N - \mathbf{X}_0$.
5. Minimalizujemy wzdłuż (nowego) \mathbf{p}_N , oznaczając znaleziony punkt przez \mathbf{X}_0 .
6. GOTO 1

Jeśli badana funkcja jest rozwijalna w szereg Taylora wokół minimum, po N iteracjach powyższej procedury kierunki $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^N$ stają się sprzężone.

Przykład — metoda Powella



Mniej kroków niż w minimalizacji po współrzędnych. W większej liczbie wymiarów byłoby *jeszcze lepiej*.

Kryteria stopu

W podanych tu metodach iteracyjnych kryterium stopu może być albo

- Przesunięcie w ostatnim kroku jest mniejsze od zadanej tolerancji,
 $\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| < \varepsilon.$
- Alternatywnie, dla metod gradientowych (najszybszego spadku, gradientów sprzężonych), a także dla zmiennej metryki, długość gradientu wyliczana w nowym punkcie jest mniejsza od zadanej tolerancji,
 $\|\nabla f|_{\mathbf{x}_{k+1}}\| < \varepsilon.$ Jest to “naturalne” kryterium dla metody gradientów sprzężonych, przez analogię z metodą algebraiczną.

Minima wyższych rzędów

W powyższych rozważaniach zakładaliśmy, że w pobliżu minimum funkcja zachowuje się w przybliżeniu jak forma kwadratowa. Co jednak, gdy minimum jest wyższego rzędu, to znaczy gdy najniższy nieznikający rząd rozwinięcia Taylora jest rzędu czwartego (szóstego, ósmego, ...), jak w przykładzie funkcji $f(x, y) = x^4 + y^4$? Takie sytuacje **zdarzają** się w praktyce, na tyle jednak rzadko, że nie warto dla nich opracowywać osobnych metod. Korzystamy wówczas z metod już poznanych, właściwych dla minimów rzędu drugiego. Należy jednak mieć świadomość, że zbieżność w procedurze precyzyjnej lokalizacji minimum będzie wolniejsza, samo zaś minimum będziemy mogli wyznaczyć mniej dokładnie. Wynika to z faktu, że w okolicach minimum wyższego rzędu funkcja jest bardziej “płaska”.