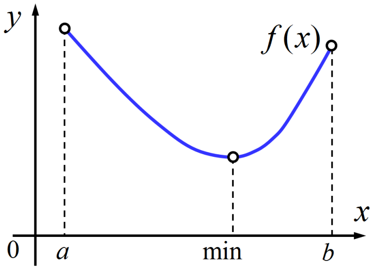
Методы оптимизации

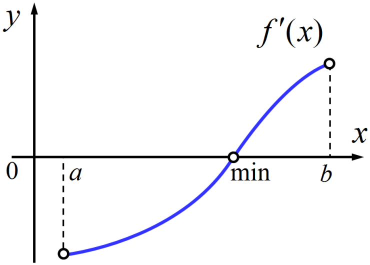
Лекция 2

3 марта 2023 г.

МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОИЗВОДНОЙ

Общая идея методов





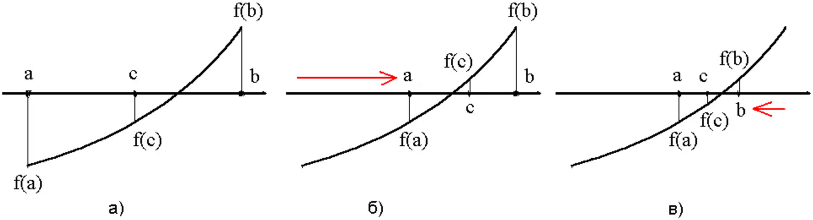
Метод средней точки направлен на повышение эффективности метода деления отрезка пополам при использовании технологии исключения отрезков за счёт замены вычислений функции в трёх точках на операцию вычисления производной в средней точке $\tilde{x} = (a+b)/2$.

Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного возрастания $f(x)$, поэтому $x^* < \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[a, \tilde{x}]$.

Если $f'(\tilde{x}) < 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного убывания $f(x)$, поэтому $x^* > \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[\tilde{x}, b]$.

Равенство $f'(\tilde{x}) = 0$ означает, что точка минимума найдена точно и $x^* = \tilde{x}$.

Метод средней точки



Такое исключение отрезков требует на каждой итерации только одного вычисления $f'(\tilde{x})$ и уменьшает отрезок поиска точки минимума ровно в два раза.

Поиск заканчивается, если абсолютная величина производной меньше заданной погрешности.

Алгоритм.

1. Задаётся начальный интервал неопределённости $L_0 := [a_0, b_0]$ и $\varepsilon > 0$ — требуемая точность.

2. Задать $k = 0$.

3. Вычислить среднюю точку $\tilde{x} := \frac{a_k + b_k}{2}$, $f'(\tilde{x})$.

4. Проверить условие окончания:

   – если $|f'(\tilde{x})| \leqslant \varepsilon$, то процесс поиска завершается и $x^* := \tilde{x}$, $f^* := f(x^*)$;

   – если $|f'(\tilde{x})| > \varepsilon$, то сравнить $f'(\tilde{x})$ с нулём.
   Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то продолжить поиск на отрезке $L_k := [a_k, b_k]$, положив $k := k + 1$, $a_k := a_{k-1}$, $b_k := \tilde{x}_{k-1}$.
   Если $f'(\tilde{x}) \leqslant 0$, то продолжить поиск на отрезке $L_k := [a_k, b_k]$, положив $k := k + 1$, $a_k := \tilde{x}_{k-1}$, $b_k := b_{k-1}$.
   Перейти к п. 3.

Метод хорд опирается на равенство $f'(x) = 0$, которое является необходимым и достаточным условием глобального минимума выпуклой дифференцируемой функции $f(x)$.

Определение.

Функция f, определённая на выпуклом множестве $X \in \mathbb{R}^n$, называется выпуклой на X, если для произвольных элементов $x^1, x^2 \in X$, и для любого числа $\lambda \in [0, 1]$ выполняется неравенство Йенсена:

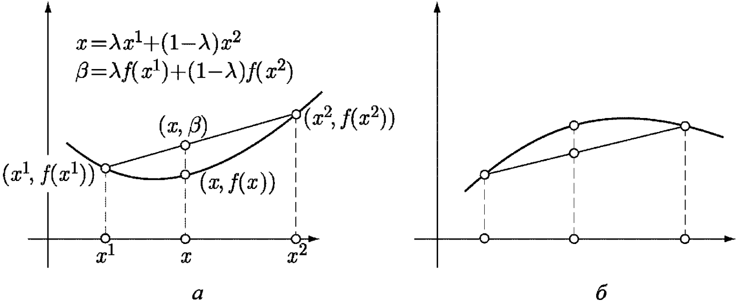
$$f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) \leqslant \lambda f(x^1) + (1 - \lambda) f(x^2).$$

Определение.

Функция $f \colon X \to \mathbb{R}$ называется квазивыпуклой или унимодальной, если для произвольных элементов $x^1, x^2 \in X$ и $\lambda \in [0, 1]$ выполняется неравенство:

$$f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) \leqslant \max(f(x^1), f(x^2)).$$

Геометрически выпуклость функции f означает, что любая точка произвольной хорды графика f располагается не ниже соответствующей точки самого графика. Для вогнутой функции взаимное расположение хорды и графика обратно.

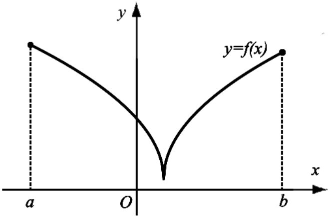


Выпуклая функция (*а*), вогнутая функция (*б*)

Метод хорд

Произвольная выпуклая функция является квазивыпуклой (унимодальной), произвольная вогнутая функция является квазивогнутой.

Пример унимодальной функции, не являющейся выпуклой:



Метод хорд

Теорема Больцано—Коши.

Пусть дана непрерывная функция на отрезке $f \in C([a,b])$. Пусть также $f(a) \neq f(b)$, и без ограничения общности предположим, что $f(a) = A < B = f(b)$. Тогда для любого $C \in [A,B]$ существует $c \in [a,b]$ такое, что $f(c) = C$.

Если на концах отрезка $L = [a,b]$ производная имеет разные знаки, то на интервале (a,b) найдется точка, в которой $f'(x) = 0$ и поиск точки минимума $f(x)$ на отрезке $[a,b]$ эквивалентен решению уравнения

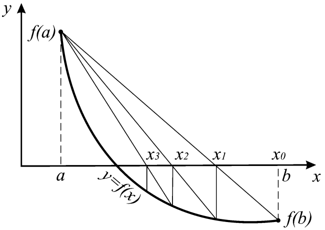
$$f'(x) = 0, \quad x \in [a,b].$$

Метод хорд

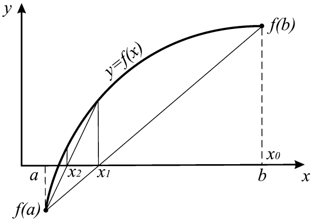
Таким образом, любой приближённый метод решения уравнения $f'(x) = 0$, $x \in [a, b]$ можно рассматривать как метод минимизации выпуклой дифференцируемой функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$. Одним из таких методов является метод хорд. Он основан на исключении отрезка путём определения точки

$$\tilde{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b)$$

пересечения с осью Ox хорды графика функции $f'(x)$ на очередном отрезке.



а)



б)

Новыми точками отрезка $[a, b]$ для осуществления следующей итерации являются концы того из отрезков $[a, \tilde{x}]$ и $[\tilde{x}, b]$, который содержит точку x^*. Его определяют по знаку производной $f'(\tilde{x})$.

Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного возрастания $f(x)$, поэтому $x^* < \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[a, \tilde{x}]$, то есть $b := \tilde{x}$.

Если $f'(\tilde{x}) < 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного убывания $f(x)$, поэтому $x^* > \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[\tilde{x}, b]$, то есть $a := \tilde{x}$.

Равенство $f'(\tilde{x}) = 0$ означает, что точка минимума найдена точно и $x^* := \tilde{x}$.

На каждой итерации, кроме первой, следует вычислять одно новое значение $f'(x)$.

Поиск заканчивается, если абсолютная величина производной меньше заданной погрешности.

Алгоритм поиска минимума функции методом хорд сводится к выполнению следующих этапов.

1. Задаётся начальный интервал неопределённости $L_0 := [a_0, b_0]$ и $\varepsilon > 0$ — требуемая точность.

2. Задать $k := 0$. Вычислить $f'(a_k), f'(b_k)$.

Если $f'(a_k)f'(b_k) < 0$, то перейти к п. 3, иначе к п. 5.

3. Вычислить $x_k := a_k - \frac{f'(a_k)}{f'(a_k) - f'(b_k)}(a_k - b_k)$ и $f'(x_k)$.

4. Проверить условие окончания:

- если $|f'(x_k)| \leqslant \varepsilon$, то процесс поиска завершается и $x^* := x_k$, $f^* := f(x^*)$;
- если $|f'(x_k)| > \varepsilon$, то сравнить $f'(x_k)$ с нулём.

Если $f'(x_k) > 0$, то продолжить поиск на отрезке $L_k = [a_k, b_k]$, положив $k := k + 1$, $a_k := a_{k-1}$, $b_k := x_{k-1}$, $f'(b_k) := f'(x_{k-1})$.
Если $f'(x_k) \leqslant 0$, то продолжить поиск на отрезке $L_k = [a_k, b_k]$, положив $k := k + 1$, $a_k := x_{k-1}$, $b_k := b_{k-1}$, $f'(a_k) := f'(x_{k-1})$.
Перейти к п. 3.

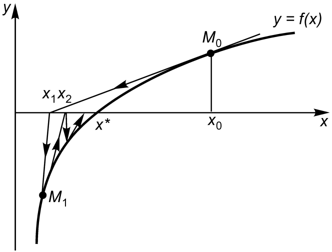
5. Если $f'(a_k) > 0$, $f'(b_k) > 0$, то $f(x)$ возрастает на отрезке $L_k = [a_k, b_k]$ и, следовательно, $x^* := a_k$.

Если $f'(a_k) < 0$, $f'(b_k) < 0$, то $f(x)$ убывает на отрезке $L_k := [a_k, b_k]$ и, следовательно, $x^* := b_k$.

Если $f'(a_k)f'(b_k) = 0$, то $x^* := a_k$ или $x^* := b_k$, в зависимости от того, на каком из концов отрезка $L_k = [a_k, b_k]$ производная $f'(x) = 0$.

Метод касательных (Ньютона—Рафсона)

Основная идея метода заключается в следующем: задаётся начальное приближение вблизи предположительного корня, после чего строится касательная к графику исследуемой функции в точке приближения, для которой находится пересечение с осью абсцисс. Эта точка берётся в качестве следующего приближения. И так далее, пока не будет достигнута необходимая точность.



Метод касательных (Ньютона—Рафсона)

Формула итеративного приближения x_n к x^* может быть выведена из геометрического смысла касательной следующим образом:

$$f'(x_n) = \operatorname{tg}\alpha_n = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_n) - 0}{x_n - x_{n+1}} = \frac{0 - f(x_n)}{x_{n+1} - x_n},$$

где α_n — угол наклона касательной прямой $y(x) = f(x_n) + (x - x_n) \cdot \operatorname{tg}\alpha_n$ к графику f в точке $(x_n; f(x_n))$.

Следовательно (в уравнении касательной прямой полагаем $y(x_{n+1}) = 0$) искомое выражение для x_{n+1} имеет вид:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Если $x_{n+1} \in (a, b)$, то это значение можно использовать в качестве следующего приближения к x^*.

Если $x_{n+1} \notin (a, b)$, то имеет место «перелёт» (корень x^* лежит рядом с границей (a, b)). В этом случае надо (воспользовавшись идеей метода половинного деления) заменять x_{n+1} на $\frac{x_n + x_{n+1}}{2}$ до тех пор, пока точка «не вернётся» в область поиска (a, b).

Метод касательных (Ньютона—Рафсона)

Алгоритм.

1. Задаётся начальный интервал неопределённости $L_0 = [a_0, b_0]$ и $\varepsilon > 0$ — требуемая точность.

2. Задать $k \coloneqq 0$ и начальную точку $x_k \in [a_k, b_k]$.

3. Вычислить $f'(x_k)$. Проверить условие окончания:

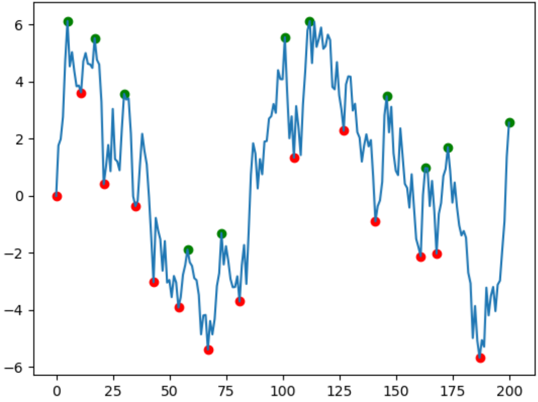
   - если $|f'(x_k)| \leqslant \varepsilon$, то процесс поиска завершается и $x^* \coloneqq x_k$, $f^* \coloneqq f(x^*)$;
   - если $|f'(x_k)| > \varepsilon$, то вычислить $f''(x_k)$ и если $f''(x_k) > 0$ перейти к п. 4. В противном случае закончить вычисление в связи с нарушением обязательного условия $f''(x_k) > 0$.

4. Вычислить $x_{k+1} \coloneqq x_k - \dfrac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$.

5. Принять $k \coloneqq k + 1$ и перейти к п. 3.

МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ МНОГОЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Задача отыскания глобального экстремума многоэкстремальной функции существенно труднее задачи минимизации унимодальной функции.



Будем предполагать, что минимизируемая функция $f(x)$ удовлетворяет на отрезке $X = [a, b]$ условию Липшица с известной константой L:

$$|f(x) - f(x')| \leqslant L|x - x'|, \quad x, x' \in X.$$

Очевидно, что функция $f(x)$ непрерывна и поэтому достигает на X своего минимального значения.

Пусть $f(x^*) = \min\limits_{x \in X} f(x)$.

Точка глобального минимума может быть не единственной.

Будем предполагать, что задано либо число N вычислений значений функции $f(x)$, либо точность δ отыскания значения минимума.

Если метод даёт в качестве приближенного к минимальному значение $f(x^0)$, то его погрешностью будем считать величину $f(x^0) - f(x^*)$ (расстояние от точки x^0 до точек глобального минимума во внимание не принимается).

Пусть задано число вычислений N. Положим

$$x_1^0 = a + \frac{b-a}{2N}, \quad x_2^0 = a + 3\frac{b-a}{2N}, \quad \ldots, \quad x_N^0 = a + (2N-1)\frac{b-a}{2N}.$$

Вычислим значения $f(x_1^0), \ldots, f(x_N^0)$ и в качестве приближения к минимальному примем значение $\min\limits_{i=1,\ldots,N} f(x_i^0)$

Пусть x^* — точка глобального минимума. Тогда, найдётся точка $x_j^0 (j \in \{1, \ldots, N\})$ такая, что $\left|x_j^0 - x^*\right| \leqslant \frac{b-a}{2N}$. С учётом условия Липшица имеем

$$0 \leqslant \min_{i=1,\ldots,N} f(x_i^0) - f(x^*) \leqslant f(x_j^0) - f(x^*) \leqslant L\left|x_j^0 - x^*\right| \leqslant L\frac{b-a}{2N}.$$

Поэтому погрешность метода не превосходит $L\dfrac{b-a}{2N}$.

Положим $x_1 = a$, $x_2 = b$. Пусть вычисления проведены в точках $x_1, \dots, x_i$: $y_1 = f(x_1), \dots, y_i = f(x_i)$.

В силу условия Липшица

$$f(x) \geqslant y_j - L|x - x_j|, \quad x \in X, \quad j = 1, \dots, i,$$

и поэтому

$$f(x) \geqslant \varphi_i(x) \overset{\text{def}}{=} \max_{j=1,\dots,i} \{y_j - L|x - x_j|\}.$$

Функция φ_i является точной минорантой, принимающей в точках $x_1, \dots, x_i$ значения соответственно $y_1, \dots, y_i$.

Точка x_{i+1} выбирается по правилу $x_{i+1} = \arg\min_{x \in X} \varphi_i(x)$.

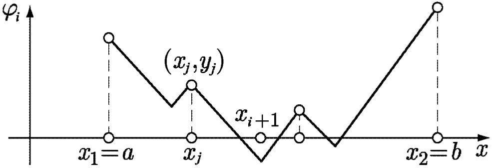


График функции φ_i

После N вычислений погрешность метода не превосходит величины

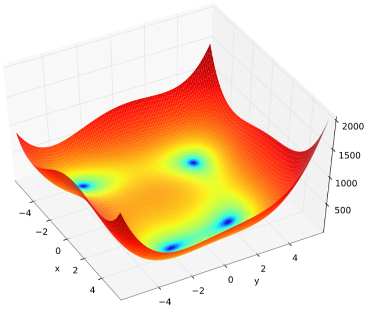
$$\min_{i=1,\dots,N} f(x_i) - \min_{x \in X} \varphi_N(x)$$

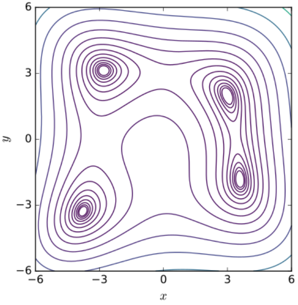
Если же требуется обеспечить отыскание значения минимума с точностью не хуже δ, то следует прекратить вычисления, как только

$$\min_{i=1,\dots,N} f(x_i) - \min_{x \in X} \varphi_N(x) \leqslant \delta$$

Функция Химмельблау

$$f(x,y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$





Проблемы:

- нет универсальных алгоритмов поиска глобального минимума
- неясно, как выбрать начальное приближение (зависит от задачи и интуиции)

Подходы:

- методы локальной оптимизации (результат зависит от выбора начального приближения)
- случайный поиск (без гарантии)
- методы глобальной оптимизации (для особых классов функций)

МЕТОДЫ БЕЗУСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ ГЛАДКИХ ФУНКЦИЙ

Перейдём к минимизации многомерных дифференцируемых функций. Решается задача

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \quad f(x) \in C^1$$

Обобщённый алгоритм

1. $k := 1$, выбрать начальную точку x_1.

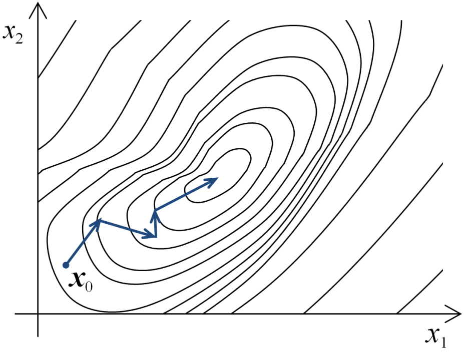
2. *Проверка условий останова*. Если условия выполнены, то поиск прекратить, x_k — решение, иначе перейти к п. 3.

3. *Расчёт направления поиска* p_k.

4. *Расчёт длины шага*. Определить α_k, обеспечивающее, например, $f(x_k + \alpha_k p_k) < f(x_k)$.

5. *Пересчёт оценки решения*. $x_{k+1} := x_k + \alpha_k p_k$, $k := k + 1$, перейти к п. 2.

Процесс функционирования алгоритмов поиска экстремума функции удобно иллюстрировать с помощью изображения траектории поиска экстремума в плоскости линий уровня функции двух переменных $y = f(x_1, x_2)$.



Типовая траектория поиска минимума функции

Предположим, что в любой точке x можно вычислить градиент функции $\nabla f(x)$.

Основная идея метода заключается в том, чтобы идти в направлении наискорейшего спуска, а это направление задаётся антиградиентом $-\nabla f(x)$.

В такой ситуации начиная с некоторого начального приближения x^0, строится итерационная последовательность

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

где параметр $\gamma_k \geqslant 0$ задаёт скорость градиентного спуска.

Этот метод, редко применяется на практике в «чистом виде», но служит моделью для построения более реалистических алгоритмов.

Градиентный метод. Сходимость

Рассмотрим простейший вариант градиентного метода, в котором $\gamma_k \equiv \gamma$:

$$x^{k+1} = x^k - \gamma \nabla f(x^k) \tag{1}$$

Теорема 1.

Пусть $f(x)$ дифференцируема на $\mathbb{R}^n$, градиент $f(x)$ удовлетворяет условию Липшица: $\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqslant L\|x - y\|$

$f(x)$ ограничена снизу: $f(x) \geqslant f^* > -\infty$

и γ удовлетворяет условию $0 < \gamma < 2/L$

Тогда в методе (1) градиент стремится к нулю:

$$\lim_{k\to\infty} \nabla f(x^k) = 0,$$

а функция $f(x)$ монотонно убывает: $f(x^{k+1}) \leqslant f(x^k)$.

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число итераций. Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)^T$.

2. Принять $k := 0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon_1$:

   – если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$;

   – если критерий не выполнен, то перейти к п. 5;

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$:

   – если неравенство выполнено, то расчёт окончен: $x^* := x^k$;

   – если нет, то перейти к п. 6.

Метод градиентного спуска с постоянным шагом

Алгоритм.

6. Задать величину шага γ.
7. Вычислить $x^{k+1} := x^k - \gamma \nabla f(x^k)$.
8. Проверить выполнение условия $f(x^{k+1}) - f(x^k) < 0$:
   - если условие выполнено, то перейти к п. 9;
   - если условие не выполнено, принять $\gamma := \dfrac{\gamma}{2}$ и перейти к п. 7.
9. Проверить выполнение условий $\left\|x^{k+1} - x^k\right\| \leqslant \varepsilon_2$, $\left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leqslant \varepsilon_2$:
   - если оба условия выполнены при текущем значении k и при $k-1$, то расчёт окончен и $x^* := x^{k+1}$;
   - если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k := k+1$ и перейти к п. 3.

Градиентный метод. Сходимость

В случае, когда минимизируемая функция f не предполагается выпуклой, градиентный метод может обеспечить лишь сходимость к множеству стационарных точек функции f.

Градиентный метод (1) (или даже с произвольным выбором γ_k), начатый из некоторой стационарной точки x^0, останется в этой точке: $x^k = x^0$ для всех k. Иными словами, градиентный метод «застревает» в любой стационарной точке — точке максимума, минимума или седловой.

Градиентный метод «не отличает» точек локального минимума от глобального и никакой гарантии сходимости к глобальному минимуму он не даёт.

В условиях теоремы 1 скорость сходимости $\nabla f(x^k)$ к 0 может быть очень медленной.

Определение.

Функция f, определённая на выпуклом множестве $X \in \mathbb{R}^n$, называется строго выпуклой на X, если

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2)$$

при всех $x^1, x^2 \in X$, $\lambda \in [0,1]$.

Определение.

Функция f, определённая на выпуклом множестве $X \in \mathbb{R}^n$, называется сильно выпуклой с константой $l > 0$, если

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \leqslant \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2) - l\lambda(1-\lambda)\frac{\left\|x^1 - x^2\right\|^2}{2}$$

при всех $x^1, x^2 \in X$, $\lambda \in [0,1]$.

Рассмотрим поведение градиентного метода для более узкого класса функций — сильно выпуклых. В этом случае градиентный метод сходится к точке минимума со скоростью геометрической прогрессии.

Теорема 2.

Пусть $f(x)$ дифференцируема на $\mathbb{R}^n$, её градиент удовлетворяет условию Липшица с константой L и $f(x)$ является сильно выпуклой функцией с константой l. Тогда при $0 < \gamma < 2/L$ градиентный метод сходится к единственной точке глобального минимума x^* со скоростью геометрической прогрессии:

$$\left\|x^k - x^*\right\| \leqslant cq^k, \quad 0 \leqslant q < 1$$

$$\text{или } \left\|x^{k+1} - x^*\right\| \leqslant q\left\|x^k - x^*\right\|$$

При практическом решении задач оптимизации постоянно приходится сталкиваться со следующей проблемой.

Пусть метод оптимизации приводит к построению минимизирующей последовательности, следует ли отсюда её сходимость к решению? То есть если $f(x)$ близко к $f(x^*)$, можно ли судить о близости точки x к решению x^*?

Такого типа проблемы относятся к области теории экстремальных задач, связанной с понятием устойчивости.

Для количественной оценки устойчивости используют следующий «нормированный» показатель.

Определение.

Назовём *обусловленностью* точки минимума x^* число

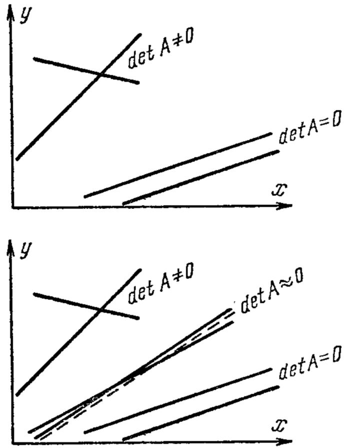
$$\mu = \overline{\lim_{\delta\to 0}} \left(\sup_{x\in L_\delta} \|x - x^*\|^2 \Big/ \inf_{x\in L_\delta} \|x - x^*\|^2 \right),$$

$$L_\delta = \{x : f(x) = f(x^*) + \delta\}.$$

Иначе говоря, μ характеризует степень вытянутости линий уровня $f(x)$ в окрестности x^*. Ясно, что всегда $\mu \geqslant 1$. Если μ велико, то линии уровня сильно вытянуты — функция имеет овражный характер, т. е. резко возрастает по одним направлениям и слабо меняется по другим. В таких случаях говорят о плохо обусловленных задачах минимизации.

Если же μ близко к 1, то линии уровня $f(x)$ близки к сферам; это соответствует хорошо обусловленным задачам. В дальнейшем мы увидим, что число обусловленности μ возникает во многих проблемах, связанных с безусловной минимизацией, и может служить одним из показателей сложности задачи.

Задача линейной алгебры. Решение системы уравнений $Ax = b$.
A — квадратная матрица, x и b — векторы.

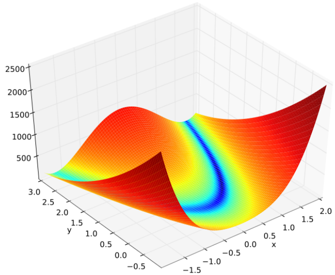


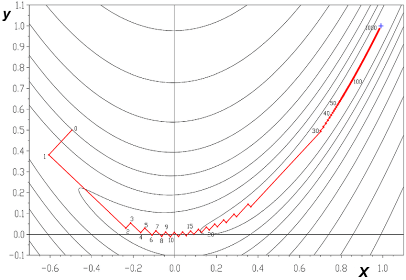
Плохо обусловленная система геометрически соответствует почти

Пример овражной функции

Функция Розенброка

$$f(x,y) = (1-x)^2 + 100(y-x^2)^2$$

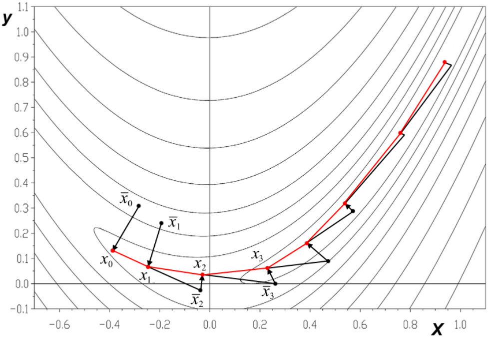




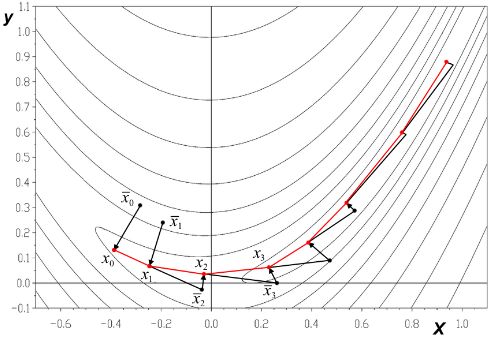
Это типичный пример овражной функции.

Градиентный метод «прыгает» с одного склона оврага на другой и обратно, иногда почти не двигаясь в нужном направлении, что существенно замедляет сходимость.

Метод градиентного спуска оказывается очень медленным при движении по оврагу, причём при увеличении числа переменных целевой функции такое поведение метода становится типичным. Для борьбы с этим явлением используется метод оврагов, суть которого очень проста. Сделав два шага градиентного спуска и, получив две точки, третий шаг следует сделать в направлении вектора, соединяющего эти точки вдоль дна оврага.



Овражный метод



При изгибах оврага овражный шаг приводит на склон оврага, с которого осуществляется спуск в район дна оврага.

Отметим, что описанный метод не работает, если дно оврага имеет размерность выше двух.

Алгоритм.

1. Задать точки $\bar{x}_0$, $\bar{x}_1$.

2. Из точек $\bar{x}_0$, $\bar{x}_1$ совершить один шаг методом наискорейшего спуска, получить точки x_0, x_1.

3. Положить $k := 1$.

4. Произвести овражный шаг, получить точку:

$$\bar{x}_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{\|x_k - x_{k-1}\|} h \operatorname{sgn}\left(f(x_k) - f(x_{k-1})\right),$$

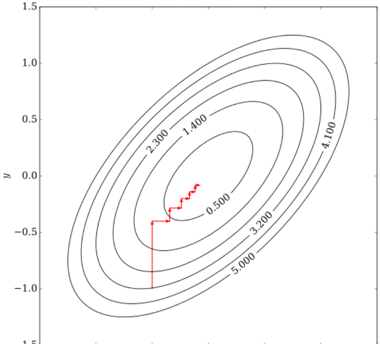
где h — овражный шаг.

5. Из точки $\bar{x}_{k+1}$ совершить один шаг методом наискорейшего спуска, получить точку x_{k+1}.

6. Проверить условие останова. При выполнении поиск прекратить, запомнить наилучшую точку, иначе $k := k + 1$, и перейти к п. 4.

Этот метод также называют методом Гаусса—Зейделя по аналогии с методом Гаусса—Зейделя для решения системы линейных уравнений.

Улучшает градиентный метод за счёт того, что на очередной итерации спуск осуществляется постепенно вдоль каждой из координат, однако новые γ_k теперь необходимо вычислять n раз за один шаг.



Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число циклов расчёта, кратное n. Найти градиент функции $\nabla f(x)$ в произвольной точке.

2. Задать номер цикла $j := 0$.

3. Проверить условие $j \geqslant M$:

   – если $j \geqslant M$, то принять $x^* := x^{jk}$ и расчёт окончен;
   – если $j < M$, то перейти к п. 4.

4. Задать $k := 0$.

5. Проверить условие $k \leqslant n - 1$:

   – если $k \leqslant n - 1$, то перейти к п. 6;
   – если $k = n$, то принять $j := j + 1$ и перейти к п. 3.

6. Вычислить $\nabla f(x^{jk})$.

7. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^{jk})\right\| < \varepsilon_1$:
   - если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^{jk}$;
   - если критерий не выполнен, то перейти к п. 8;
8. Найти t_k^* из условия:

$$t_k^* = \arg\min_{t_k \geqslant 0} f(x^{jk} - t_k \nabla f(x^{jk})_{k+1} e_{k+1})$$

9. Вычислить точку $x^{jk+1} := x^{jk} - t_k^* \nabla f(x^{jk})_{k+1} e_{k+1}$.
10. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{jk+1} - x^{jk}\right\| \leqslant \varepsilon_2, \quad \left|f(x^{jk+1}) - f(x^{jk})\right| \leqslant \varepsilon_2$$

   - если оба условия выполнены при текущем значении цикла j и при $j-1$, то расчёт окончен и $x^* := x^{jk+1}$;
   - если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k := k+1$ и перейти к п. 5.

Метод наискорейшего спуска

Рассмотрим общий градиентный метод

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

при различных способах выбора длины шага γ_k.

На первый взгляд, кажется, что можно значительно повысить эффективность градиентного метода, если идти до минимума по направлению антиградиента:

$$\gamma_k = \arg\min_{\gamma \geqslant 0} \varphi_k(\gamma), \quad \varphi_k(\gamma) = f(x^k - \gamma \nabla f(x^k)).$$

При этом мы получаем так называемый метод наискорейшего спуска.

Алгоритм.

1. Задать начальную точку x^0, погрешности расчёта $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M — предельное число итераций. Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)^T$.

2. Принять $k := 0$.

3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f(x^k)\right\| < \varepsilon_1$:

   – если критерий выполнен, расчёт закончен $x^* := x^k$;

   – если критерий не выполнен, то перейти к п. 5;

5. Проверить выполнение неравенства $k \geqslant M$:

   – если неравенство выполнено, то расчёт окончен: $x^* := x^k$;

   – если нет, то перейти к п. 6.

Алгоритм.

6. Задать величину шага γ^* из условия:

$$\gamma^* \coloneqq \arg\min_{\gamma \geqslant 0} f(x^k - \gamma \nabla f(x^k))$$

7. Вычислить $x^{k+1} \coloneqq x^k - \gamma^* \nabla f(x^k)$.

8. Проверить выполнение условий $\left\| x^{k+1} - x^k \right\| \leqslant \varepsilon_2$, $\left| f(x^{k+1}) - f(x^k) \right| \leqslant \varepsilon_2$:

- если оба условия выполнены при текущем значении k и при $k-1$, то расчёт окончен и $x^* \coloneqq x^{k+1}$;
- если хотя бы одно из условий не выполнено, то принять $k \coloneqq k+1$ и перейти к п. 3.

Вопросы?