

Методы оптимизации

Лекция 4. **Численные методы безусловной минимизации функции нескольких переменных**

Селина Елена Георгиевна

Численные методы безусловной минимизации функции нескольких переменных

Пусть теперь $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, то есть имеем дело с функцией п переменных и нужно по-прежнему найти точку минимума.

В методах прямого поиска минимума целевой функции (или методах нулевого порядка) используют информацию только о значениях этой функции. Из методов этого типа рассмотрим метод покоординатного спуска.

Метод покоординатного спуска

Здесь минимизация осуществляется циклами, по п шагов в каждом. Пусть $x^k = (x_1^k, x_2^k, ..., x_n^k)^T$.

- Фиксируем значения $x_2^k, ..., x_n^k$ и проводим минимизацию по переменной x_1 . Получаем $(x_1^{k+1}, x_2^k, ..., x_n^k)^T$, на этом первый шаг окончен.
- Фиксируем значения $x_1^{k+1}, x_3^k \dots, x_n^k$ и проводим минимизацию по переменной x_2 . Получаем $(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_n^k)^T$.
- ...
- Фиксируем значения $x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{n-1}^{k+1}$ и проводим минимизацию по переменной x_n . Получаем $(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_n^{k+1})^T$.

Итак, после п шагов, соответствующих каждой из переменных завершаем первый цикл, получая $x^{k+1} = (x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_n^{k+1})^T$.

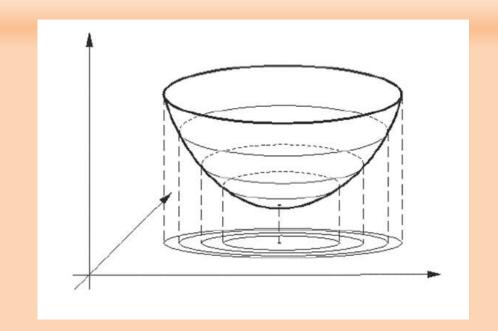
Процесс повторяется до тех пор, пока для некоторого заданного положительного ε не выполнится условие остановки

$$|f(x^{k+1}) - f(x^k)| \le \varepsilon$$
 или $||x^{k+1} - x^k|| \le \varepsilon$,

либо их комбинация.

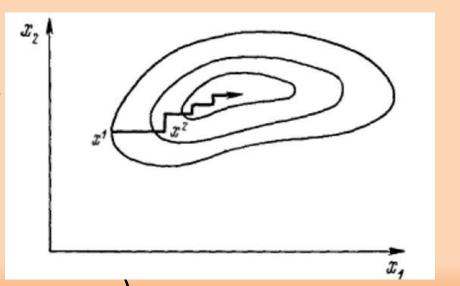
На каждом шаге цикла приходится решать задачу одномерной минимизации, которую мы рассматривали ранее.

Иллюстрируют работу методов многомерной оптимизации обычно с помощью линий уровня — геометрического места точек пространства аргументов, для которых значения исследуемой функции одинаковы.



Для функций двух переменных линии уровня изображаются на

плоскости, что позволяет наглядно продемонстрировать работу алгоритма. Так на нижнем рисунке видно, что в методе покоординатного спуска минимизация ведется поочередно по направлениям параллельным осям координат (по ортам).



МЕТОД ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА

Пусть требуется найти наименьшее значение целевой функции

U=
$$f(M)=f(x_1, x_2,..., x_n)$$
.

Здесь через М обозначена точка n-мерного пространства с координатами $x_1, x_2, ..., x_n$:

$$M=(x_1, x_2,..., x_n).$$

Выберем какую-нибудь начальную точку M_0 = $(x_{10}, x_{20}, ..., x_{n0})$ и рассмотрим функцию f при фиксированных значениях всех переменных, кроме первой: $f(x_1, x_{20}, x_{30}, ..., x_{n0})$. Тогда она превратится в функцию одной переменной x_1 . Изменяя эту переменную , будем двигаться от начальной точки x_1 = x_{10} в сторону убывания функции , пока не дойдем до ее минимума при x_1 = x_{11} , после которого она начинает возрастать. Точку с координатами $(x_{11}, x_{20}, x_{30}, ..., x_{n0})$ обозначим через M_1 , при этом $f(M_0)$ > $f(M_1)$.

МЕТОД ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА

Фиксируем теперь переменные $x_1=x_{11}$, $x_{30}=x_{30}$, $x_4=x_{40}$..., $x_n=x_{n0}$ и рассмотрим функцию f как функцию одной переменной x_2 : $f(x_{11},x_2,x_{30},x_{40},...,x_{n0}).$

Изменяя x_2 , будем опять двигаться от начального значения $x_2 = x_{20}$ в сторону убывания функции, пока не дойдем до минимума при $x_2 = x_{21}$.

Точку с координатами (x_{11} , x_{21} , x_{30} , x_{40} ,..., x_{n0}) обозначим через M_2 , при этом $f(M_1)>f(M_2)$.

Проведем такую же минимизацию целевой функции по переменным x_3 , x_4 , ..., x_n . Дойдя до переменной x_n , снова вернемся к x_1 и продолжим.

МЕТОД ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА

Эта процедура вполне оправдывает название метода. С ее помощью мы строим последовательность точек M_0 , M_1 , M_2 , ..., которой соответствует монотонная последовательность значений функции $f(M_0)>f(M_1)>f(M_2)>...$

Обрывая ее при некотором шаге К, можно приближенно принять значение функции f(M_к) за ее наименьшее значение в рассматриваемой области.

Данный метод сводит задачу поиска наименьшего значения функции нескольких переменных к многократному решению одномерных задач оптимизации. Для решения же одномерных задач можно использовать любой известный метод, например, методы: половинного деления, золотого сечения, хорд, Ньютона и т.д.

Пусть целевая функция имеет вид:

$$U=x_1^2+x_2^2+1.5*x_1*x_2$$

и поиск начинается из точки M_0 =(3;3). $f(M_0)$ =31.5.

Сначала изменяем координату x_1 , оставив x_2 постоянной и равной x_{20} =3.

Тогда целевая функция будет иметь вид

$$U=f(x_1,3)=x_1^2+9+4.5*x_1$$
.

Минимум U= $f(x_1,3)$ найдем, приравнивая к нулю производную $df(x_1,3)/dx_1$, т.е.

$$df(x_1,3)/dx_1=2*x_1+4.5=0.$$

Отсюда первый экстремум по x_1 равен x_1 =-2.25 и ему соответствует точка M_1 с координатами x_1 =-2.25, x_2 =3,т.е. M_1 =(-2.25;3).

$$f(M_1)=3.83 < f(M_0).$$

Теперь оставим неизменной координату x_1 и равной -2.25, т.е. x_1 =-2.25, а будем изменять x_2 . Целевая функция в этом случае примет вид

$$U=f(-2.25;x_2)=(-2.25)^2+x_2^2+1.5*(-2.25)*x_2$$

Далее находим минимум функции по x_2 :

$$df(-2.25;x_2)/dx_2=2*x_2-3.375=0.$$

Отсюда следует, что x_2 =1.6875.

Данному экстремуму соответствует точка $M_2 = (-2.25; 1.6875)$.

$$f(M_2)=2.21 < f(M_1) < f(M_0).$$

Теперь опять повторяем цикл вычислений для x_1 , закрепляя $x_2 = 1.6875$.

$$U=f(x_1;1.6875)=x_1^2+1.6875^2+1.5*1.6875*x_1;$$

$$df(x_1; 1.6875)/dx_1 = 2*x_1 + 1.5*1.6875 = 0.$$

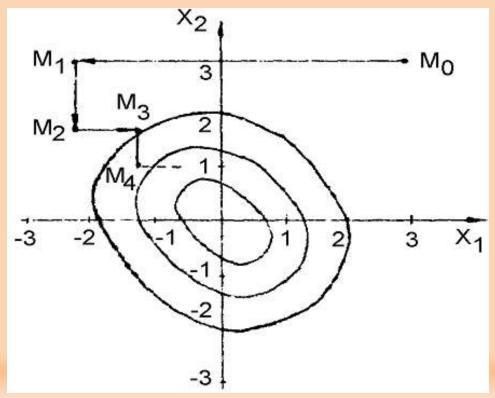
Из последнего уравнения следует, что $x_1 = -1.2656...$

Найденному экстремуму соответствует точка $M_3 = (-1.2656; 1.6875)$.

$$f(M_3)=1.26 < f(M_2) < f(M_1) < f(M_0).$$

Далее аналогично продолжаем процесс. В результате поиска получаем ломанную линию, состоящую из взаимно перпендикулярных прямых, точки излома которой - это точки M_0 , M_1 , M_2 Они находятся в местах касания этих прямых с линиями уровня целевой функции:

$$U = f(x_1, x_2) = const$$



Поиск прекращается, когда расстояние между точками M_i и M_{i-1} n-мерного вещественного пространства R_n , полученными в двух соседних итерациях, станет меньше некоторой, наперед заданной достаточно малой положительной величины.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ МНОГОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ГРАДИЕНТНЫМИ МЕТОДАМИ

Градиентные методы

Методы 1-го порядка используют информацию о производной функции. Если ограниченная снизу целевая функция f(x) является дифференцируемой на множестве \mathbb{R}^n , то алгоритм поиска точки x^* ее минимума можно построить, используя информацию о градиенте этой функции. Такие методы называются градиентными.

Градиентные методы безусловной оптимизации используют только первые производные целевой функции и являются методами линейной аппроксимации на каждом шаге, т. е. целевая функция на каждом шаге заменяется касательной гиперплоскостью к ее графику в текущей точке.

Во всех этих методах предполагается, что f(x), ∇f существуют и непрерывны. Один из таких методов — метод наискорейшего спуска.

Впервые такой метод рассмотрел и применил еще Коши в XVIIIв.

Теория градиентного метода

3. Метод градиентного спуска. В природе мы нередко наблюдаем явления, сходные с решением задачи на нахождение минимума. К ним относится, в частности, стекание воды с берега котлована на дно. Упростим ситуацию, считая, что берега котлована «унимодальны», т. е. они гладкие и не содержат локальных углублений или выступов. Тогда вода устремится вниз в направлении наибольшей крутизны берега в каждой точке.

Переходя на математический язык, заключаем, что направление наискорейшего спуска соответствует направлению наибольшего убывания функции. Из курса математики известно, что направление наибольшего возрастания функции двух переменных u = f(x, y) характеризуется ее градиентом

$$\operatorname{grad} u = \frac{\partial u}{\partial x} e_1 + \frac{\partial u}{\partial y} e_2,$$

где e_1 , e_2 — единичные векторы (орты) в направлении координатных осей. Следовательно, направление, противоположное градиентному, укажет направление наибольшего убывания функции. Методы, основанные на выборе пути оптимизации с помощью градиента, называются градиентными.

Теория градиентного метода

Идея метода градиентного спуска состоит в следующем. Выбираем некоторую начальную точку $M_0(\mathbf{x}^{(0)})$, $\mathbf{x}^{(0)} = \{x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}\}$, и вычисляем в ней градиент рассматриваемой функции. Делаем шаг в направлении, обратном градиентному:

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha^{(1)} \operatorname{grad} f(M_0).$$

В результате приходим в точку $M_1(\mathbf{x}^{(1)})$, значение функции в которой обычно меньше первоначального ($\alpha^{(1)} > 0$). Если это условие не выполнено, т. е. значение функции не изменилось либо даже возросло, то нужно уменьшить шаг $\alpha^{(1)}$. В новой точке процедуру повторяем: вычисляем градиент и снова делаем шаг в обратном к нему направлении:

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha^{(2)} \operatorname{grad} f(M_1).$$

Теория градиентного метода

Процесс продолжается до получения наименьшего значения целевой функции. Строго говоря, момент окончания поиска наступит тогда, когда движение из полученной точки с любым шагом приводит к возрастанию значения целевой функции. Если минимум функции достигается внутри рассматриваемой области, то в этой точке градиент равен нулю, что также может служить сигналом об окончании процесса оптимизации. Приближенно момент окончания поиска можно определить аналогично тому, как это делается в других итерационных методах. Например, можно проверить близость значений целевой функции на двух последовательных итерациях:

$$|f(\mathbf{x}^{(k)}) - f(\mathbf{x}^{(k-1)})| < \varepsilon.$$

Метод градиентного спуска обладает тем же недостатком, что и метод покоординатного спуска: при наличии оврагов на поверхности сходимость метода очень медленная.

Пример для функции трех переменных

Рассмотрим функцию трех переменных f(x, y, z).

Вычислим частные производные: $\frac{df}{dx}$; $\frac{df}{dy}$; $\frac{df}{dz}$, и составим с их помощью вектор, который называется градиентом функции.

Grad f(x, y, z) =
$$\frac{df(x, y, z)}{dx}i + \frac{df(x, y, z)}{dy}j + \frac{df(x, y, z)}{dz}k$$

į, j, k - единичные векторы параллельные координатным осям (орты).

Частные производные характеризуют изменение функции по каждой независимой переменной в отдельности. Вектор градиента дает общее представление о поведении функции в окрестности точки (x, y, z). В направление градиента функция возрастает с максимальной скоростью. В обратном направлении, которое часто называют антиградиентным, функция убывает с максимальной скоростью.

Пример для функции трех переменных

Модуль градиента

$$|gradf(x,y,z)| = \sqrt{\left(\frac{df}{dx}\right)^2 + \left(\frac{df}{dy}\right)^2 + \left(\frac{df}{dz}\right)^2}$$

определяет скорость возрастания и убывания целевой функции в направление градиента и антиградиента. В других направлениях целевая функция будет изменяться с меньшей скоростью. При переходе от одной точке к другой меняется как модуль градиента, так и его направление.

Метод градиентного спуска

Выбираем каким-либо способом начальную точку выделяем в ней градиент целевой функции и сделаем небольшой шаг в антиградиентном направлении. В результате мы придем в точку, в которой целевая функция будет иметь меньшее значение. Во вновь полученной точке снова вычисляем градиент и снова делаем шаг в антиградиентном направлении. Продолжая этот процесс будем двигаться в сторону уменьшения целевой функции. Выбор направления движения позволяет надеяться, продвижение к точке минимума в этом случае будет более быстрым, чем в методе покоординатного спуска.

Формулы для вычисления координат точек в методе градиентного спуска

Поскольку градиент - это вектор, а при выполнении каких-либо операций мы должны использовать однородные математические объекты, то вместо точки n-мерного пространства будем пользоваться понятием радиуса вектора этой точки

точка
$$M_0 = (x_0, y_0, z_0)$$

радиус вектор
$$OM_0 = x_0 i + y_0 j + z_0 k$$

$$\overline{OM_1} = \overline{OM_0} - h * gradf(M_0) = i \left[x_0 - h \frac{df}{dx}(M_0) \right] + j \left[y_0 - h \frac{df}{dy}(M_0) \right] + k \left[z_0 - h \frac{df}{dz}(M_0) \right];$$

$$M_{1} = \left(x_{0} - h\frac{df}{dx}(M_{0}); y_{0} - h\frac{df}{dy}(M_{0}); z_{0} - h\frac{df}{dz}(M_{0})\right)$$

Формулы для вычисления координат точек в методе градиентного спуска

В общем виде, координата точки M_i выражается через координату точки M_{i-1} .

$$M_{i} = \left(x_{i-1} - h\frac{df}{dx}(M_{i-1}); y_{i-1} - h\frac{df}{dy}(M_{i-1}); z_{i-1} - h\frac{df}{dz}(M_{i-1})\right)$$

Формулы для вычисления частных производных можно получить только в том случае, если целевая функция задана аналитически.

В противном случае, эти производные вычисляются с помощью численного дифференцирования.

$$\frac{df}{dx_{i}} = \frac{1}{\Delta x_{i}} \left[f\left(x_{1}, x_{2}, x_{3}, \dots, x_{i} + \Delta x_{i}, \dots, x_{n}\right) - f\left(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{i}, \dots, x_{n}\right) \right]$$

Поиск прекращается когда $|gradf| \leq \varepsilon$

Пример. Найти максимальное значение функции

$$f = 2x_1 + 4x_2 - x_1^2 - 2x_2^2$$

с точностью ε≤0,05.

Решение. Найдем градиент функции:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2 - 2x_1; \frac{\partial f}{\partial x_2} = 4 - 4x_2;$$

$$\nabla f(X) = ((2 - 2x_1); (4 - 4x_2)).$$

Возьмем в качестве первого приближения $X^{(0)} = (0; 0)$, т. е.

$$x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = 0.$$

Тогда значение функции $f(X^{(0)}) = 0$, а вектор-строка градиента функции равен $\nabla f(X^{(0)}) = (2;4)$. Выберем шаг итерации λ =0,25 и рассчитаем параметры следующей точки:

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + \lambda \cdot \nabla f(x_1^{(0)}) = 0 + 0.25 \cdot 2 = 0.5$$

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + \lambda \cdot \nabla f\left(x_2^{(0)}\right) = 0 + 0.25 \cdot 4 = 1.0$$

Вычислим значение функции цели в новой точке и определим степень приближения:

$$f(X^{(1)}) = 2 \cdot 0.5 + 4 \cdot 1 - 0.25 - 2 \cdot 1 = 2.75$$

 $|f(X^{(1)}) - f(X^{(0)})| = |2.75 - 0| = 2.75 > \varepsilon$

Так как заданная точность не достигнута, продолжим итерационный процесс. Градиент функции в новой точке будет определяться вектором-строкой $\nabla f(X^{(1)}) = (1;0)$. Рассчитаем параметры следующей точки:

$$x_1^{(2)} = x_1^{(1)} + \lambda \cdot \nabla f(x_1^{(1)}) = 0.5 + 0.25 \cdot 1 = 0.75$$

$$x_2^{(2)} = x_2^{(1)} + \lambda \cdot \nabla f\left(x_2^{(1)}\right) = 1,0 + 0,25 \cdot 0 = 1,0$$

Значение функции цели в исследуемой точке и степень приближения равны:

$$f(X^{(2)}) = 2 \cdot 0.75 + 4 \cdot 1 - 0.5625 - 2 \cdot 1 = 2.9375$$

 $|f(X^{(2)}) - f(X^{(1)})| = |2.9375 - 2.75| = 0.1875 > \varepsilon$

Продолжим вычисления. В точке $X^{(2)} = (0,75;1,0)$ градиент функции будет иметь следующий вектор-строку: $\nabla f(X^{(2)}) = (0,5;0)$.

Рассчитываем параметры третьей точки итерации:

$$x_1^{(3)} = x_1^{(2)} + \lambda \cdot \nabla f(x_1^{(2)}) = 0.75 + 0.25 \cdot 0.5 = 0.875$$

$$x_2^{(3)} = x_2^{(2)} + \lambda \cdot \nabla f(x_2^{(2)}) = 1,0 + 0,25 \cdot 0 = 1,0$$

Значение функции цели в этой точке и степень приближения равны:

$$f(X^{(3)}) = 2 \cdot 0.875 + 4 \cdot 1 - 0.875^2 - 2 \cdot 1 = 2.9844$$

 $|f(X^{(3)}) - f(X^{(2)})| = |2.9844 - 2.9375| = 0.0469 < \varepsilon$

Тогда в пределах заданной точности получаем ответ:

$$X^* = (0.875; 1.0)$$

 $f_{max} = 2.9844$

Метод наискорейшего спуска

При использовании градиентного спуска в задачах оптимизации основной объем вычислений приходится обычно на вычисление градиента целевой функции в каждой точке траектории спуска. Поэтому целесообразно уменьшить количество таких точек без ущерба для самого решения. Это достигается в методе наискорейшего спуска. Согласно этому методу, после определения в начальной точке антиградиентного направления, в этом направлении делают не один шаг, а двигаются до тех пор, пока целевая функция убывает, достигая таким образом минимума в некоторой точке. В этой точке снова определяют направление спуска (с помощью градиента) и ищут новую точку минимума целевой функции и т.д. В этом методе спуск происходит гораздо более крупными шагами и градиент функции вычисляется в меньшем числе точек.

Метод наискорейшего спуска

Идея его проста: градиент целевой функции f(x) в любой точке есть вектор в направлении наибольшего возрастания значения функции. Следовательно, антиградиент будет направлен в сторону наибольшего убывания функции и является направлением наискорейшего спуска. Антиградиент (и градиент) ортогонален поверхности уровня f(x)в точке x.

Пусть в точке x требуется определить направление наискорейшего спуска, то есть направление наибольшего локального уменьшения f(x). Разложим f(x) в ряд Тейлора в окрестности точки x и отбросим члены второго порядка по Δx и выше :

$$f(x) = f(x^{(k)}) + (\nabla f(x^{(k)}), \Delta x) + \cdots$$

Локальное уменьшение f(x) определяется вторым слагаемым, т. е. наибольшее уменьшение f(x) будет тогда, когда $(\nabla f(x^{(k)}), \Delta x)$ будет иметь наибольшую отрицательную величину. Этого можно добиться выбором $S^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$

Этот случай соответствует наискорейшему локальному спуску

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

Шаг 0. Задать $\varepsilon>0$, $x^{(1)}$ начальную точку. Положить k=1. Шаг 1. Если $\|\nabla f(x^{(k)})\|<\varepsilon$ то конец и оптимум $x^*=x^{(k)}$, Иначе вычислить $S^{(k)}=\frac{\nabla f(x^{(k)})}{\|\nabla f(x^{(k)})\|}$.

Шаг 2. Решить задачу одномерной оптимизации

$$\min_{\lambda} f(x^{(k)} + \lambda_k S^{(k)})$$
 Положить $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k S^{(k)}$ Шаг 3. Положить k=k+1 и перейти на шаг 1.

Делевая функция $f(x_1,x_2)={x_1}^2+{x_2}^2+1.5x_1x_2$ начальная точка М0 = (2,3)

$$\frac{df}{dx_1}(M_0) = 2x_1 + 1.5x_2 = 2 * 2 + 1.5 * 3 = 8.5$$

$$\frac{df}{dx_2}(M_0) = 2x_2 + 1.5x_1 = 2*3 + 1.5*2 = 9$$

$$x_{11} = x_{10} - h_1 \frac{df}{dx_1} (M_0) = 2 - h_1 * 8.5$$

$$x_{21} = x_{20} - h_1 \frac{df}{dx_2} (M_0) = 3 - h_1 * 9$$

Подставим эти значения в целевую функцию:

$$f(x_{11}, x_{21}) = (2 - 8.5h_1)^2 + (3 - 9h_1)^2 + 1.5(2 - 8.5h_1)(3 - 9h_1) = 268h_1^2 - 166.75h_1 + 22$$

Возьмем частную производную по $^{h_{\!_{1}}}$ и приравняв ее нулю, найдем величину шага $^{h_{\!_{1}}}$, при котором мы приходим в точку минимума.

$$\frac{df}{dh_1} = 536h_1 - 166.75 = 0; h_1 = 0.31$$

$$\frac{df^2}{dh_1^2} = 536\rangle 0$$

следовательно, точка
$$x_{11}(x_{11},x_{21})$$
 - это точка минимума. $x_{11}=2-0.31*8.5=-0.635;$ $x_{21}=3-0.31*9=0.21;$ $M_1(-0.635;0.21)$

Повторяем процедуру, считая начальной точкой точку $m{M}_1$.

$$\begin{split} &\frac{df}{dx_1}\Big(M_1\Big) = 2x_1 + 15x_2 = 2*(-0.635) + 1.5*0.21 = -0.955 \\ &\frac{df}{dx_2}\Big(M_1\Big) = 2x_2 + 1.5x_1 = 2*0.21 + 1.5*(-0.635) = -0.5325 \\ &x_{12} = x_{11} - h_2 \frac{df}{dx_1}\Big(M_1\Big) = -0.635 + h_2*0.955 \\ &x_{22} = x_{21} - h_2 \frac{df}{dx_2}\Big(M_1\Big) = 0.21 + h_2*0.5325 \\ &f\Big(x_{12}; x_{22}\Big) = \Big(-0.635 + 0.955h_2\Big)^2 + \Big(0.21 + 0.5325h_2\Big)^2 + 1.5\Big(0.635 + 0.955h_2\Big)\Big(0.21 + 0.5325h_2\Big) \\ &f\Big(x_{12}; x_{22}\Big) = 0.2473 - 1.19558h_2 + 1.9559h_2^2; \end{split}$$

$$f(x_{12}; x_{22}) = 0.2473 - 1.19558h_2 + 1.9559h_2^2;$$

$$\frac{df}{dh_2} = -1.19558 + 2 *1.9559h_2 = 0; h_2 = 0.3052;$$

$$x_{12} = -0.635 + 0.3052 *0.955 = -0.34343;$$

$$x_{22} = 0.21 + 0.3052 *0.5325 = 0.37254;$$

$$M_2 = (-0.34343; 0.37254)$$

и т.д.

Удачный выбор начальной точки M_0 , может существенно сократить объем вычислительной работы.

Спасибо за внимание!