

СОДЕРЖАНИЕ

1 Методы локальной оптимизации	3
1.1 Минимум функции одного переменного	3
1.2 Метод градиентного спуска	6
1.3 Метод тяжелого шара	8

1 Методы локальной оптимизации

Оптимизация – это задача нахождения экстремума (минимума или максимума) целевой функции в некоторой области конечномерного векторного пространства, ограниченной набором линейных и/или нелинейных равенств и/или неравенств.

Во многих практических важных случаях для целевой функции многих переменных $f(\mathbf{x})$ задача оптимизации может быть сформулирована в виде:

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow \min,$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – вектор неизвестных (управляющих параметров); \min – минимальное значение функции в ограниченной или неограниченной области изменения неизвестных.

Для нахождения абсолютного минимума целевой функции $f(\mathbf{x})$ существует только один способ: найти все локальные минимумы этой функции, сравнить их и выбрать из них тот, в котором функция принимает наименьшее значение.

1.1 Минимум функции одного переменного

Для функции одной переменной $f(x)$, задача нахождения минимума эквивалента задачи нахождения корней уравнения:

$$\frac{df(x)}{dx} = 0 \quad (1)$$

Эта одномерная задача нередко возникает в практических приложениях. Кроме того, большинство методов решения многомерных задач сводится к поиску одномерного минимума.

Предположим, что $f(x)$ задана и кусочно-непрерывна на отрезке $x \in [a, b]$, и имеет на этом отрезке (включая его концы) только один локальный минимум. Построим итерационный процесс, сходящийся к этому минимуму.

Вычислим значение функции на концах отрезка $x = a$ и $x = b$, а также в двух внутренних точках $x_1 < x_2$. Так как функция $f(x)$ имеет минимум на отрезке $x \in [a, b]$, то справедливо утверждение:

$$f(a) \geq f(x_1), \quad f(x_2) \leq f(b)$$

Сравним все четыре значения функции между собой $f(a)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$ и $f(b)$ и выберем среди них наименьшее.

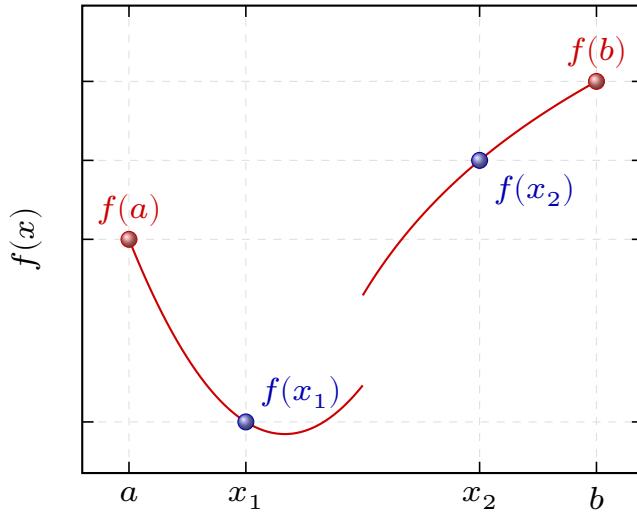


Рисунок 1 – График кусочно-непрерывной функции $y = f(x)$, имеющей минимум на отрезке $x \in [a, b]$

Из рисунка 1 видно, что наименьшее значение функция достигает в точке $x = x_1$:

$$f(x_1) < f(a) < f(x_2) < f(b)$$

Очевидно, что минимум функции $f(x)$ расположен в одном из прилегающих к точке $x = x_1$ отрезков, то есть минимум находится либо в пределах отрезка $[a, x_1]$, либо в $[x_1, x_2]$.

Поэтому на первом шаге итерационного процесса отбрасывается отрезок $[x_2, b]$, и для поиска минимума функции $f(x)$ рассматривается отрезок $[a, x_2]$, то есть область поиска минимума функции сужается:

$$|a - x_2| < |a - b|, \quad \text{так как} \quad x_2 < b.$$

Полагая $b = x_2$, на новом отрезке $[a, b]$ вновь необходимо выбрать две внутренние точки, вычислить в них и на концах отрезка значения функции $f(x)$, и сделать следующий шаг итерационного процесса.

Критерием остановки итерационного процесса является условие выполнения неравенства, которое гарантирует малость размера области поиска ми-

нимума по сравнению с заранее заданной погрешность метода:

$$(b - a) \leq \epsilon,$$

где ϵ – погрешность метода.

Практически на каждом шаге выбирается две точки x_1 и x_2 внутри отрезка $[a, b]$, равноудаленные от концов этого отрезка. Например, если точки x_1 и x_2 делят отрезок $[a, b]$ на три равные части (рисунок 2), то координаты этих точек могут быть определены из соотношений:

$$x_1 = a + \frac{b - a}{3} = \frac{2a + b}{3}, \quad x_2 = b - \frac{b - a}{3} = \frac{a + 2b}{3}.$$



Рисунок 2 – Схематическое изображение точек деления отрезка $[a, b]$

Оценка длины отрезка после первого итерационного шага составит:

$$\ell_1 = (b - a) - \frac{b - a}{3} = \frac{2}{3} \cdot (b - a),$$

после второго шага:

$$\ell_2 = \ell_1 - \frac{\ell_1}{3} = \frac{2}{3} \cdot \ell_1 = \left(\frac{2}{3}\right)^2 \cdot (b - a),$$

а после k -ого итерационного шага:

$$\ell_k = \left(\frac{2}{3}\right)^k \cdot (b - a).$$

Таким образом, чтобы погрешность вычисления ℓ_k была менее ϵ , для числа итераций k справедлива оценка:

$$\left(\frac{2}{3}\right)^k \cdot (b - a) \leq \epsilon \quad \rightarrow \quad k = \left\lceil \frac{\ln(b - a) - \ln(\epsilon)}{\ln(3) - \ln(2)} \right\rceil$$

1.2 Метод градиентного спуска

Градиентный спуск – метод нахождения локального экстремума (минимума или максимума) функции многих переменных $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ с помощью движения вдоль градиента этой функции. Это наиболее простой в реализации из всех методов локальной оптимизации, но имеет относительно малую (линейную) скорость сходимости.

Градиент ∇ это вектор, указывающий направление наибольшего возрастания некоторой функции f , значение которой меняется от одной точки пространства к другой (скалярного поля), а по величине (модулю) равный скорости роста этой величины в этом направлении. Компонентами вектора градиента являются частные производные f по всем её аргументам:

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \quad (2)$$

Для случая трёхмерного пространства градиентом скалярной функции $f(x, y, z)$ называется векторная функция:

$$\text{grad } f = \nabla f,$$

где ∇ – векторный дифференциальный оператор набла, компоненты которого являются частными производными по координатам:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Следует отметить, что оператор набла не принадлежит тому же пространству, что и обычные векторы, а говоря точнее, скалярное и векторное произведение для него определено с некоторыми различиями. Оператор ∇ действует на те скалярные поля, что стоят от него справа, и не действует на стоящие от него слева. Поэтому скалярное и векторное произведение с участием ∇ *не коммутативны* и не антикоммутативны, как это свойственно для таких произведений обычных векторов.

Минимизация целевой функции $f(\mathbf{x})$ сводится к итерационному процессу последовательного выбора нового вектора неизвестных \mathbf{x}_{k+1} , такого чтобы значение функции в новой точке было меньше чем в предыдущих:

$$f(\mathbf{x}_0) > f(\mathbf{x}_1) > \dots > f(\mathbf{x}_k) > f(\mathbf{x}_{k+1}) > \dots$$

Предполагая, что новый вектор неизвестных мало отличается от предыдущего ($\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \approx 0$), можно воспользоваться линейным приближением для разложения в ряд Тейлора целевой функции:

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

где k – номер итерационного шага процесса; \mathbf{x}_k – значение неизвестных на k -ой итерации.

Если в качестве нового вектора неизвестных выбрать:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \lambda \cdot \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (4)$$

то из (3) получим:

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k) - \lambda \cdot \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|^2 \rightarrow f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k) \quad (5)$$

где $\lambda > 0$ – малое положительное число (параметр метода), имеющий смысл скорости градиентного спуска; $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\| \geq 0$ – норма вектора градиента (неотрицательное число):

$$\|\nabla f\| = \sqrt{(\nabla f, \nabla f)}$$

Таким образом, выбор нового вектора неизвестных \mathbf{x}_{k+1} в соответствии с выражением (4), гарантирует монотонное убывание целевой функции $f(\mathbf{x})$ в каждой итерации. Поэтому основная идея метода градиентного спуска заключается в том, чтобы последовательно идти в направлении наибольшего уменьшения целевой функции, которое задаётся антиградиентом $-\nabla f(\mathbf{x})$.

Практически можно задать некоторое число $\varepsilon > 0$, связанное с выбранной точностью вычислений, и проводить итерации до тех пор, пока на k -ой итерации не будут выполнены одно или несколько неравенств вида:

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| < \varepsilon_1, \quad \|f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})\| < \varepsilon_2 \quad (6)$$

Алгоритм метода градиентного спуска

- 1) Задают начальное приближение (x_0, y_0) , скорость градиентного спуска λ , а также точность расчёта ε .
- 2) Рассчитывают градиент целевой функции в текущей точке $\nabla_0 = \nabla f(x_0, y_0)$.

3) Определяют новый вектор неизвестных в соответствии с соотношением (4):

$$\begin{cases} x_1 = x_0 - \lambda \cdot \nabla_{0_x}, \\ y_1 = y_0 - \lambda \cdot \nabla_{0_y}, \end{cases}$$

где ∇_{0_x} и ∇_{0_y} – компоненты вектора градиента в выбранной системе координат.

4) Рассчитывают величину расстояния между двумя точками:

$$r = \sqrt{(x_0 - x_1)^2 + (y_0 - y_1)^2}$$

5) Проверяют условие остановки итерационного процесса: если $r < \varepsilon$, то итерационный процесс останавливается; иначе текущую точку считают начальной $x_0 = x_1$ и $y_0 = y_1$ и переходят к шагу (2) итерационного процесса.

1.3 Метод тяжелого шара

Поиск минимума функции многих переменных $f(\mathbf{x})$ методом “тяжелого шара“ основан на аналогии движения материальной частицы массой m в консервативном силовом поле $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ в вязкой среде.

В соответствии с принципом минимальной энергии тело смещается в положение, которое минимизирует общую потенциальную энергию системы $f(\mathbf{x}) \rightarrow \min$. Поэтому если предположить, что функция $f(\mathbf{x})$ является потенциальной энергией частицы в консервативном силовом поле $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla f(\mathbf{x})$, и частица перемещается в пространстве \mathbf{x} минимизируя свою энергию, то уравнение движения этой частицы можно записать в виде:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \\ m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} - \alpha \cdot \mathbf{v} \end{cases} \quad (7)$$

где \mathbf{x} – положение частицы в выбранной системе координат; \mathbf{v} и α – скорость и коэффициент вязкого трения частицы в среде, соответственно.

Этот метод используется в методе стохастического градиентного спуска и в качестве расширения алгоритмов обратного распространения ошибок для обучения искусственных нейронных сетей.

Поиск минимума данным методом начинается с задания начальных усло-

вий, которые, как правило, формулируются в виде:

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0 \\ \boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{v}_0 \end{cases}, \quad (8)$$

где \boldsymbol{x}_0 – начальное приближения для поиска минимума функции; \boldsymbol{v}_0 – “начальная скорость“ в пространстве неизвестных.

Масса частицы m и коэффициент вязкого трения α являются эвристическими параметрами метода и выбираются произвольным образом, отражающим специфику решаемой задачи.