

## **СОДЕРЖАНИЕ**

1 Методы локальной оптимизации . . . . .	3
1.1 Минимум функции одного переменного . . . . .	3
1.2 Метод градиентного спуска . . . . .	6
1.3 Метод тяжелого шара . . . . .	9
1.4 Поиск оптимального положения склада . . . . .	10

# 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.

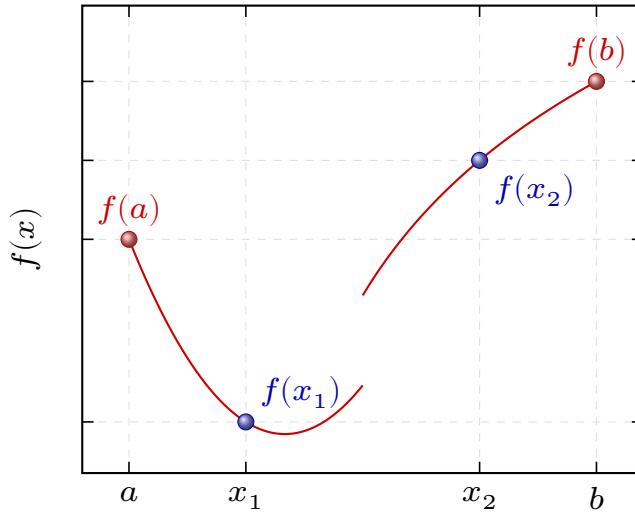


Рисунок 1 – График кусочно-непрерывной функции  $y = f(x)$ , имеющей минимум на отрезке  $x \in [a, b]$

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  $[a, x_2]$ , при этом 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  $\epsilon$  – погрешность метода.

*Симметричный метод* поиска минимума функции одной переменной  $f(x)$  основан на выборе внутренних точек  $x_1$  и  $x_2$  отрезка  $[a, b]$ , которые равноудалены 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  $\ell_k$  была менее  $\epsilon$ , для числа итераций  $k$  справедлива оценка:

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

Симметричный метод поиска минимума функции является аналогом метода дихотомии для нахождения корня уравнения  $f(x) = 0$ . Метод применим к

недифференцируемым функциям и всегда сходится. Следует отметить, что если на отрезке  $[a, b]$  функция  $f(x)$  имеет несколько локальных минимумов, то итерационный процесс сойдется к одному из этих минимумов, но не обязательно к наименьшему.

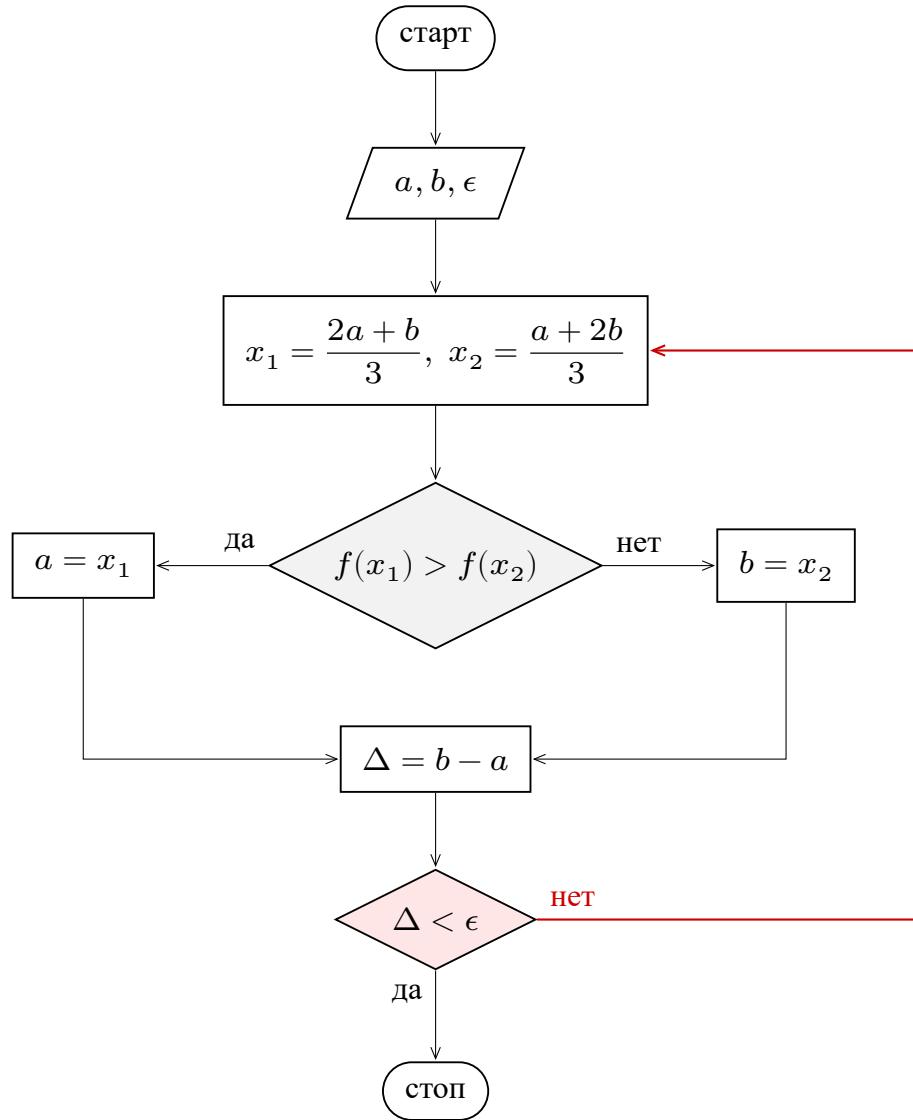


Рисунок 3 – Блок-схема алгоритма нахождения минимума функции  $f(x)$  одного переменного

## 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 (ли-

нейную) скорость сходимости.

Градиент  $\nabla$  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  $\nabla$  – 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  $\nabla$  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  $\nabla$  *не коммутативны* и не антисимметричны, 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:

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

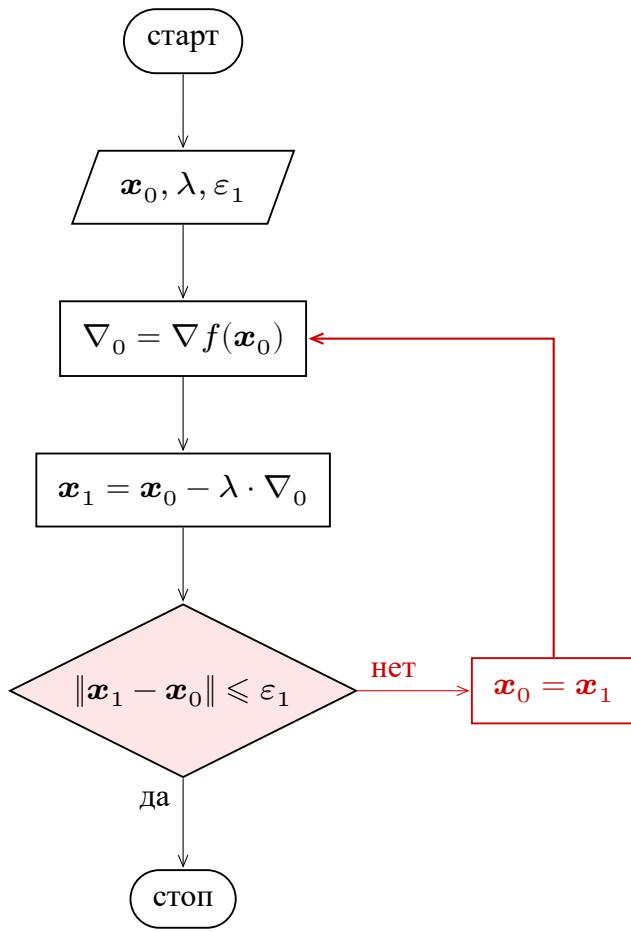


Рисунок 4 – Блок-схема алгоритма нахождения минимума функции  $f(\mathbf{x})$  многих переменных методом градиентного спуска

### 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 урав-

нение движения этой частицы можно записать в виде:

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

где  $x$  – положение частицы в выбранной системе координат;  $v$  и  $\alpha$  – 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 условий, которые, как правило, формулируются в виде:

$$\begin{cases} x(0) = x_0 \\ v(0) = v_0 \end{cases}, \quad (8)$$

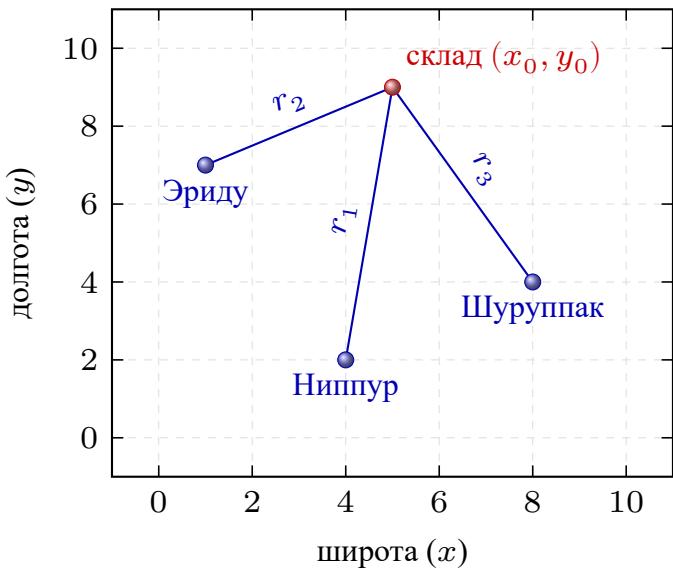
где  $x_0$  – начальное приближения для поиска минимума функции;  $v_0$  – “начальная скорость“ в пространстве неизвестных.

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

#### 1.4 Поиск оптимального положения склада

Рассмотрим задачу по нахождению географических координат расположения склада готовой продукции, таких чтобы суммарное расстояние от склада до потребителей продукции было минимальным.

Известны географические координаты трех городов: [Ниппур](#) (4, 2), [Эриду](#) (1, 7) [Шуруппак](#) (8, 4).



1) Обозначим неизвестные:

$x$  – географическая широта положения склада;

$y$  – географическая долгота положения склада.

2) Целевая функция – суммарное расстояние от склада до всех магазинов:

$$f = r_1 + r_2 + r_3,$$

где  $r_1, r_2$  и  $r_3$  – расстояние от *склада* до городов Ниппур, Эриду и Шурупак, соответственно.

3) Поверхность планеты *Земля* будем считать “плоской” в пределах области поиска положения Склада. Поэтому для нахождения расстояния от склада до каждого города воспользуемся теоремой *Пифагора Самосского*:

$$\begin{aligned}r_1 &= \sqrt{(x_1 - x)^2 + (y_1 - y)^2} \\r_2 &= \sqrt{(x_2 - x)^2 + (y_2 - y)^2} \\r_3 &= \sqrt{(x_3 - x)^2 + (y_3 - y)^2},\end{aligned}$$

где  $x_1$  и  $y_1$  – географическая широта и долгота города Ниппур;  $x_2$  и  $y_2$  – географическая широта и долгота города Эриду;  $x_3$  и  $y_3$  – географическая широта и долгота города Шурупак.

Таким образом, целевая функция – суммарное расстояние от склада до всех городов, с учетом данных задания о географических координатах городов

(Ниппур, Эриду и Шуруппак), запишется в виде:

$$\begin{aligned} f(x, y) = & \sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2} \\ & + \sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2} \\ & + \sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2} \end{aligned}$$

4) Определим градиент целевой функции  $\nabla f(x, y)$ :

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

Для этого найдем частные производные целевой функции от широты ( $x$ ) и долготы ( $y$ ) положения склада:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} = & -\frac{4-x}{\sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2}} \\ & -\frac{1-x}{\sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2}} \\ & -\frac{8-x}{\sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial y} = & -\frac{2-y}{\sqrt{(4-x)^2 + (2-y)^2}} \\ & -\frac{7-y}{\sqrt{(1-x)^2 + (7-y)^2}} \\ & -\frac{4-y}{\sqrt{(8-x)^2 + (4-y)^2}} \end{aligned}$$

- 5) Выбираем (в общем случае, произвольно) начальные координаты склада, например,  $x_0 = 5$  и  $y_0 = 9$ , скорость градиентного спуска  $\lambda = 2$  и точность расчёта  $\varepsilon_1 = 0.25$  (единиц измерения).
- 6) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_0 = f(5, 9) = & \sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2} \\ & + \sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2} \\ & + \sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2} = 17.37 \end{aligned}$$

Определим градиент целевой функции в начальной точке положения склада

$(x_0, y_0)$ :

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} &= -\frac{4-5}{\sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2}} \\ &\quad - \frac{1-5}{\sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2}} \\ &\quad - \frac{8-5}{\sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2}} = 0.52\end{aligned}$$

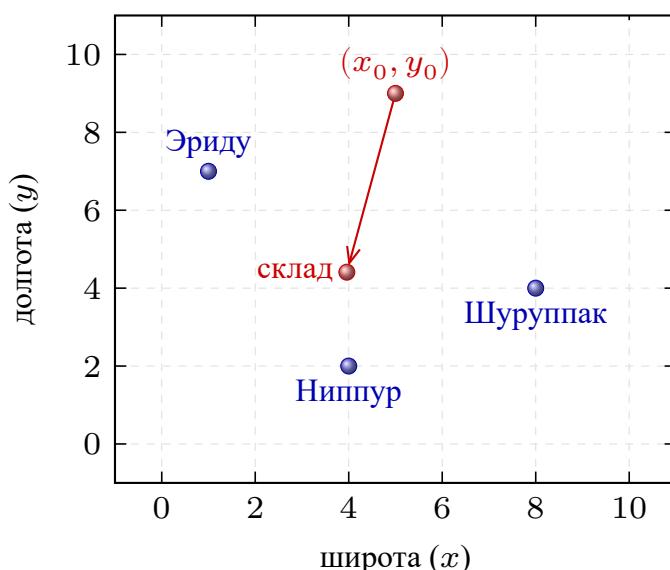
$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} &= -\frac{2-9}{\sqrt{(4-5)^2 + (2-9)^2}} \\ &\quad - \frac{7-9}{\sqrt{(1-5)^2 + (7-9)^2}} \\ &\quad - \frac{4-9}{\sqrt{(8-5)^2 + (4-9)^2}} = 2.29\end{aligned}$$

Зная градиент целевой функции в начальной точке  $\nabla f(x_0, y_0) = (0.52, 2.29)$ , определим новые географические координаты склада:

$$x_1 = x_0 - \lambda \cdot \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} = 5 - 2 \cdot 0.52 = 3.96$$

$$y_1 = y_0 - \lambda \cdot \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{\substack{x=5 \\ y=9}} = 9 - 2 \cdot 2.29 = 4.41$$

Новые географические координаты склада ( $x_1 = 3.96$ ;  $y_1 = 4.41$ ).



Рассчитаем величину “шага“ – расстояния между двумя последовательными положениями склада:

$$r = \sqrt{(5 - 3,96)^2 + (9 - 4,41)^2} = 4,71$$

Сравниваем величину текущего “шага“  $r$  и заданную точность расчетов  $\varepsilon_1$ :

$$r = 4.71 > 0.25 = \varepsilon_1$$

Величина текущего “шага“  $r$  больше заданной точности расчетов  $\varepsilon_1$ , следовательно, *итерационный процесс продолжаем!*

- 7) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$\begin{aligned} R_1 = f(3.96, 4.41) = & \sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2} \\ & + \sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2} \\ & + \sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2} = 10.41 \end{aligned}$$

Суммарное расстояние уменьшилось:

$$R_1 = 10.41 < 17.37 = R_0.$$

Рассчитаем градиент целевой функции в новой точке положения склада  $x_1 = 3.96$  и  $y_1 = 4.41$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\substack{x_1 = 3.96 \\ y_1 = 4.41}} = & -\frac{4 - 3.96}{\sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{1 - 3.96}{\sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{8 - 3.96}{\sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2}} = -0.26 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\substack{x_1 = 3.96 \\ y_1 = 4.41}} = & -\frac{2 - 4.41}{\sqrt{(4 - 3.96)^2 + (2 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{7 - 4.41}{\sqrt{(1 - 3.96)^2 + (7 - 4.41)^2}} \\ & -\frac{4 - 4.41}{\sqrt{(8 - 3.96)^2 + (4 - 4.41)^2}} = 0.44 \end{aligned}$$

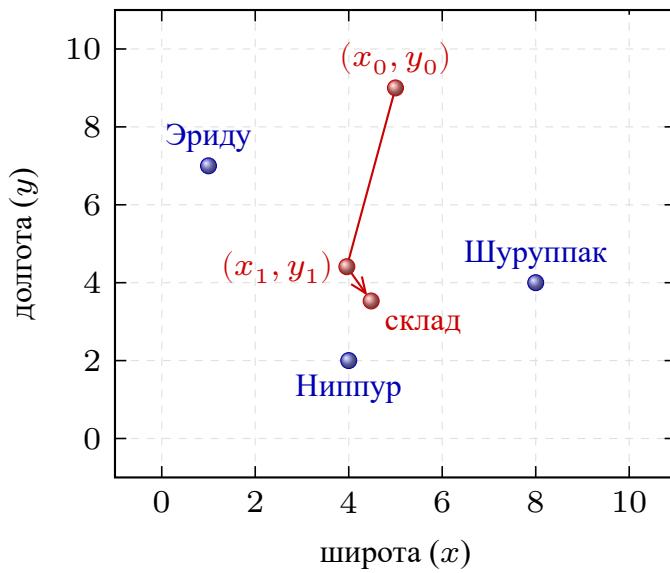
Зная градиент целевой функции в текущей точке  $\nabla f(x_1, y_1) = (-0.26, 0.44)$ ,

определим новые географические координаты склада:

$$x_2 = x_1 - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\substack{x=3.96 \\ y=4.41}} = 3.96 - 2 \cdot (-0.26) = 4.48$$

$$y_2 = y_1 - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\substack{x=3.96 \\ y=4.41}} = 4.41 - 2 \cdot 0.44 = 3.53$$

*Новые географические координаты склада ( $x_2 = 4.48, y_2 = 3.53$ ).*



Рассчитаем величину “шага“ – расстояния между двумя последовательными положениями склада:

$$r = \sqrt{(3.96 - 4.48)^2 + (4.41 - 3.53)^2} = 1.03$$

Сравниваем величину текущего “шага“  $r$  и заданную точность расчетов  $\varepsilon_1$ :

$$r = 1.03 > 0.25 = \varepsilon$$

Величина текущего “шага“  $r$  больше заданной точности расчетов  $\varepsilon_1$ , следовательно, *итерационный процесс продолжаем!*

8) Текущее суммарное расстояние от склада до всех городов:

$$R_2 = f(4.48, 3.53) = \sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2} \\ + \sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2} \\ + \sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2} = 10.07$$

Рассчитаем градиент целевой функции в новой точке положения склада  $x_2 = 4.48$  и  $y_2 = 3.53$ :

$$\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\substack{x_2 = 4.48 \\ y_2 = 3.53}} = -\frac{4 - 4.48}{\sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2}} \\ -\frac{1 - 4.48}{\sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2}} \\ -\frac{8 - 4.48}{\sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2}} = 0.02$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\substack{x_2 = 4.48 \\ y_2 = 3.53}} = -\frac{2 - 3.53}{\sqrt{(4 - 4.48)^2 + (2 - 3.53)^2}} \\ -\frac{7 - 3.53}{\sqrt{(1 - 4.48)^2 + (7 - 3.53)^2}} \\ -\frac{4 - 3.53}{\sqrt{(8 - 4.48)^2 + (4 - 3.53)^2}} = 0.11$$

Зная градиент целевой функции в текущей точке  $\nabla f(x_2, y_2) = (0.02, 0.11)$ , определяют новое географическое положение склада:

$$x_3 = x_2 - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\substack{x=4.48 \\ y=3.53}} = 4.48 - 2 \cdot 0.02 = 4.45 \\ y_3 = y_2 - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\substack{x=4.48 \\ y=3.53}} = 3.53 - 2 \cdot 0.11 = 3.30$$

*Новые географические координаты склада ( $x_0 = 4.45, y_0 = 3.30$ ).*

