Poszukiwanie minimum wartości funkcji metodą największego spadku w 2D

Wiktoria Zaczyk

13.05.2021

1 Wstęp

Minimalizacja funkcji
Inaczej nazywana optymalizacją, jej zadaniem jest poszukiwanie odpowiednio minimum lub maksimum funkcji wielu zmiennych. Chodzi o znalezienie punktu spełniającego warunek

$$\min f(\vec{x}) = f(\vec{x^*}) \Leftrightarrow \bigwedge_{\vec{x} \in R^n} f(\vec{x^*}) < f(\vec{x}), \quad \text{gdzie } \vec{x} = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^T. \tag{1}$$

Gradient funkcji
Dla funkcji celu $f(\vec{x}) \in C^2$, tj. poszukującej minimum badanej funkcji wejściowej definiuje się funkcję wektorową będącą gradientem funkcji

$$g(\vec{x}) = \nabla f(\vec{x}) = \left[\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_n},\right]^T. \tag{2}$$

Należy pamiętać, iż gradient skierowany jest zawsze w stronę narastających wartości.

Pochodna kierunkowa funkcji celu
Różniczkę zupełną funkcji celu definiuje się jako iloczyn skalarny wektorów

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n} dx_n = \nabla f(\vec{x}) dx. \tag{3}$$

Punkty $\vec{x}$ i $\vec{x'}$ nazywane są powiązanymi ze sobą, jeżeli wektor $\vec{u}$ wyznacza kierunek prostej je łączącej, stąd

$$\vec{x}(\lambda) = \vec{x'} + \lambda \vec{u}. \tag{4}$$

Dla bardzo małych zmian wartości λ można uogólnić wzór (4).

$$d\vec{x} = \vec{u} d\lambda \tag{5}$$

Na prostej łączacej ustalone punkty $\vec{x}$ oraz $\vec{x'}$ wartość funkcji celu zależna jest od zmiennej λ.

$$F(\lambda) = f(\vec{x'} + \lambda \vec{u}) = f(\vec{x}) \tag{6}$$

Mając na uwadze powyższe powiązania, oblicza się różniczkę zupełną dla funkcji celu zależnej od λ

$$dF = df = \nabla^T f(\vec{x}) \vec{u} d\lambda. \tag{7}$$

Finalnie, wyrażenie na **pochodną kierunkową funkcji** celu w punkcie $\vec{x}$ dla kierunku $\vec{u}$ jest postaci

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \left.\frac{df(\vec{x})}{d\lambda}\right|_{\vec{u}} = \nabla^T f(\vec{x}) \vec{u}, \tag{8}$$

jednak korzystając z niej należy ją wyznaczać w każdej iteracji.

Znajdowanie minimum funkcji przy pomocy pochodnej kierunkowej
Przybliżanie należy rozpocząć z punktu $\vec{x_0}$ przechodząc przez kolejne punkty $\vec{x_1}, \vec{x_2}, \ldots, \vec{x_n}$ w kierunku spadku wartości funkcji. Pozwala to wyznaczyć ciąg przybliżeń poszukiwanego minimum. Należy przerwać algorytm iteracyjny w momencie, gdy zostanie spełniony jeden z warunków:

1. Norma różnicy wektorów z sąsiednich kroków jest mniejsza od zadanego progu: $||\vec{x}^{i+1} - \vec{x}^{i}|| < \epsilon \; \nabla f(\vec{x}) = 0$
2. W kolejnych iteracjach wartość normy $||\vec{x}^{i+1} - \vec{x}^{i}||$ wzrasta, co oznacza brak zbieżności.

Metoda największego spadku
Korzystając z pochodnej kierunkowej funkcji w punkcie x dla wektora kierunkowego $\vec{u}$ o długości równej $||\vec{u}|| = 1$

$$\left.\frac{\mathrm{d}f(\vec{x'})}{\mathrm{d}\lambda}\right|_{\vec{u}} = \frac{\mathrm{d}F(0)}{\mathrm{d}\lambda} = \nabla^T f(\vec{x'})\vec{u}, \tag{9}$$

oraz z nierówność Schwartza

$$\nabla^T f(\vec{x'})\vec{u} \geqslant -||\nabla^T f(\vec{x'})|| \cdot ||\vec{u}|| = -||\nabla^T f(\vec{x'})|| = \min. \tag{10}$$

Należy wybrać wektor kierunkowy o postaci

$$\vec{u} = \frac{-\nabla f(\vec{x'})}{||\nabla f(\vec{x'})||} \tag{11}$$

aby wskazywał kierunek największego spadku, a pochodna kierunkowa mogła osiągnąć najmniejszą wartość.

$$\frac{\mathrm{d}F(0)}{\mathrm{d}\lambda} = -\nabla^T f(\vec{x'})\frac{\nabla f(\vec{x'})}{||\nabla f(\vec{x'})||} = \min \tag{12}$$

2 Cel zadania

Celem laboratorium było znalezienie minimum przy pomocy metody największego spadku w 2D funkcji:

$$f(\vec{r}) = f(x,y) = \frac{5}{2}(x^2 - y)^2 + (1-x)^2, \tag{13}$$

zaczynając od przybliżenia $\vec{r_0}$:

$$\vec{r_{i+1}} = \vec{r_i} - h \cdot \nabla\, f(\vec{r})|_{\vec{r}=\vec{r_i}} \qquad \text{gdzie } \nabla f(\vec{r}) = \left[\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right], \tag{14}$$

które było korygowane w kolejnych iteracjach. Składowe gradientu ze wzoru (14) obliczano numerycznie korzystając z faktu, iż

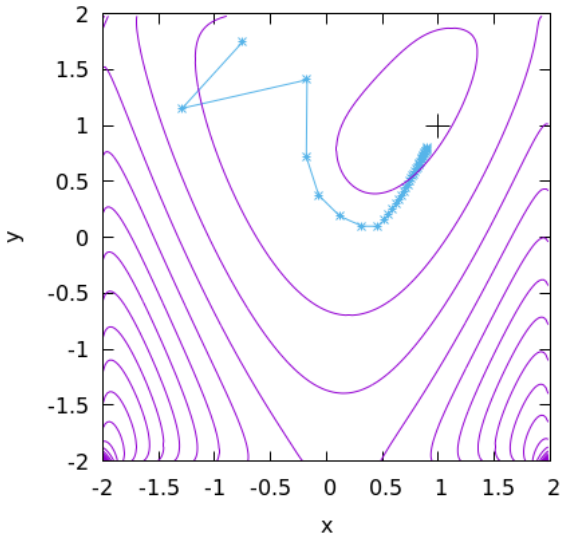
$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x} = \frac{f(\vec{r} + \Delta\vec{e_x}) - f(\vec{r} - \Delta\vec{e_x})}{2\Delta} \tag{15}$$

$$\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial y} = \frac{f(\vec{r} + \Delta\vec{e_y}) - f(\vec{r} - \Delta\vec{e_y})}{2\Delta} \tag{16}$$

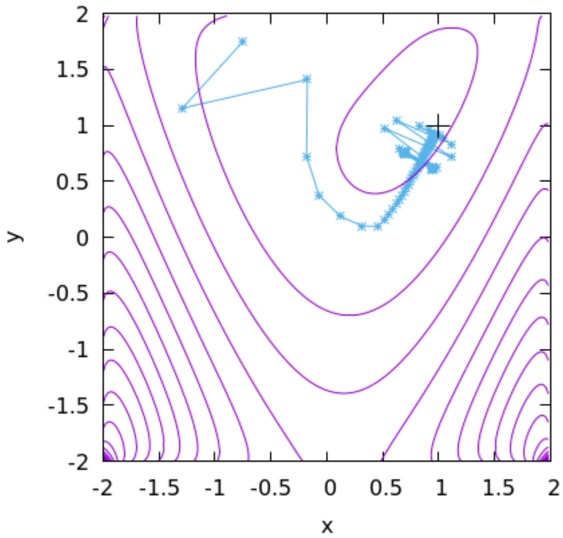
gdzie $\vec{e_x}$ i $\vec{e_y}$ są wektorami układu kartezjańskiego. Przyjęto następujące założenia: $\Delta = 10^{-4}$, punkt początkowy $\vec{r_0} = [-0.75, 1.75]$, stała $h = 0.01$. Warunki stopu: $||\vec{r_{i+1}} - \vec{r_i}||_2 < \epsilon$ dla $\epsilon_1 = 10^{-2}$, $\epsilon_2 = 10^{-3}$ Maksymalna liczba iteracji 1000, a $x, y \in [-2, 2]$ z krokiem w obu kierunkach równym 0.02

3 Wyniki

Korzystając skryptu programu *Gnuplot* sporządzono wykresy dla obu przypadków. Dokładne minimum funkcji było jedno i wyniosło $\vec{r}_{min} = [1, 1]$ (zaznaczone czarnym krzyżykiem). Na rysunkach znajdują się także kontur wartości funkcji $f(x, y)$ oraz kolejne przybliżenia minimum.



Rysunek 1: Położenia kolejnych przybliżeń minimum funkcji $f(x, y)$ w poszczególnych iteracjach dla $\epsilon = 10^{-2}$. Program wykonał 37 iteracji.



Rysunek 2: Położenia kolejnych przybliżeń minimum funkcji $f(x, y)$ w poszczególnych iteracjach dla $\epsilon = 10^{-3}$. Program wykonał 1000 iteracji.

4 Wnioski

Wykresy dowodzą, iż ciężko jest wybrać trafne kryterium zbieżności. Dla pierwszego przypadku nie udało się osiągnąć minimum. Zmniejszając rząd zbieżności o jeden, zastosowanie znalazł drugi warunek stopu z uwagi na niekończące się oscylacje wokół poszukiwanego minimum. Potwiedziło to również teoretyczny kształt przebiegu dla funkcji z wydłużonym konturem. Duże znaczenie dla lepszej efektywności uzyskiwanych przybliżeń ma wartość h. Podczas laboratorium skoki nie były regulowane, co znalazło szczególne odbicie w punktach funkcji o niewielkim gradiencie, a w konsekwencji nie osiągnięto zbieżności. Metoda największego spadku może być mało wydajna, jeśli kontur wartości funkcji celu jest wydłużony.