Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра «Прикладная математика»

ОТЧЁТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ «МЕТОДЫ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА I И II ПОРЯДКА» ПО ДИСЦИПЛИНЕ «МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ»

Выполнили
студенты группы 3630102/70401

Зуев В. А.
Курова А. Н.
Мельникова А. Н.
Стоян А. С.

Руководитель
к. ф.-м. н., доц.

Родионова Елена Александровна

Санкт-Петербург
2020

1 Постановка задачи

Поставлена проблема двумерной минимизации:

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + cos(x_1 + 3x_2) - x_1 + 2x_2 \to \min_{x_1, x_2} \tag{1}$$

Необходимо:

- Решить задачу (1) методом наискорейшего спуска;
- Доказать сходимость метода наискорейшего спуска применительно к данной функции;
- Обосновать выбор условия окончания вычислений для метода одномерной минимизации по соответствующему условию градиентного метода, показать справедливость вывода в ходе вычислительного эксперимента при точности градиентного метода 0.01;
- Решить ту же задачу методом Ньютона второго порядка.

2 Обоснование применимости методов

2.1 Доказательство сходимости метода I порядка

Оценим сходимость метода наискорейшего спуска, используя теорему 1.1 [1]. Покажем, что функция 1 подчиняется следующим условиям:

$$f(x) \in C^1(\mathbb{R}) \tag{2}$$

$$\exists m \in \mathbb{R} : m \leq f(x) \forall x \in \mathbb{R}^2 \tag{3}$$

$$\exists L \in \mathbb{R} : \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L \|x - y\| \, \forall x, y \in \mathbb{R}^2 \tag{4}$$

Для функции, удовлетворяющей вышеперечисленным условиям, в случае итерационной схемы градиентного спуска с параметром $eps > 0$, характеризующим окончание вычислений, теорема утверждает следующее: если номер шага $k \to \infty$, то выполняется условие выхода $\|\nabla f(x_k)\|^2 \leq eps$ (иначе говоря, при выполнении условий (2), (3), (4) рано или поздно градиентный спуск – в частности, метод наискорейшего спуска – закончит работу).
Проверим выполнение условий.

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 - \sin(x_1 + 3x_2) - 1$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = 2x_2 - 3\sin(x_1 + 3x_2) + 2$$

Частные производные по координатам непрерывны при любых x_1, x_2, значит, функция непрерывно дифференцируема в $\mathbb{R}^2$ и (2) выполнено.
Несложно убедиться, что (3) также выполнено. Перепишем минимизируемую функцию:

$$f(x_1, x_2) = (x_1^2 - x_1 + \frac{1}{4}) - \frac{1}{4} + (x_2^2 + 2x_2 + 1) - 1 + cos(x_1 + 3x_2) =$$
$$= (x_1 - \frac{1}{2})^2 + (x_2 + 1)^2 - 1\frac{1}{4} + cos(x_1 + 3x_2) \geq -2\frac{1}{4}$$

Докажем существование константы Липшица L. Не умаляя общности, найдём L для первой нормы $\|x\|_1 \overset{def}{=} |x_1| + |x_2|$, пользуясь эквивалентностью норм в $\mathbb{R}^2$. Пусть

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$$

Тогда

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| &= |2(x_1 + x_2) - 4\sin(x_1 + 3x_2) - 2(y_1 + y_2) + 4\sin(y_1 + 3y_2)| \leq \\ &\leq 2|x_1 + x_2 - (y_1 + y_2)| + 4|\sin(x_1 + 3x_2) - \sin(y_1 + 3y_2)| \end{aligned}$$

Преобразуем трансцендентное слагаемое. Обозначим $a := x_1 + 3x_2, b := y_1 + 3y_2$

$$|\sin(a) - \sin(b)| = 2\left|\sin\frac{a-b}{2}\cos\frac{a+b}{2}\right| \leq 2\left|\sin\frac{a-b}{2}\right| \leq |a - b| = |x_1 - y_1 + 3(x_2 - y_2)|$$
$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq 2|(x_1 + x_2) - (y_1 + y_2)| + 4|(x_1 - y_1) + 3(x_2 - y_2)| \leq$$
$$\leq 4|\Delta\vec{x}| + 16|\Delta\vec{x}| = 20|\Delta\vec{x}| \Rightarrow \exists L = 20$$

2.2 Обоснование применимости метода золотого сечения для нахождения шага

При поиске шага ставится задача: выйдя из точки x_k, найти в направлении антиградиента $-\nabla f(x_k)$ точку, дающую минимум функции $f(x_k - \alpha\nabla f(x_k))$. Пусть мы находимся в точке x_k и выбираем шаг α_k. Если L – константа Липшица градиента $\nabla f(x_k)$, то ближайший локальный минимум не может быть ближе к x_k, чем $\frac{\|\nabla f(x_k)\|}{L}$. Также нерационально искать минимум слишком далеко от x_k, чтобы метод золотого сечения не занимал много времени. Можно искать $\Delta x \in \left[\frac{\|f(x_k)\|}{L}; 2\frac{\|f(x_k)\|}{L}\right]$ – в этом случае все возможные значения $f(x_{k+1})$ будут не больше, чем $f(x_k)$ (упрощённый пример приведён на рис. (1): исследуя на минимум $f(x) = -sin(x)$ и выходя из точки ноль, получаем $L = 1$, $\|\nabla f(x)\| = 1$ и интервал $[1; 2]$), но на практике это может привести к ненужному измельчению шага. Авторы работы считают разумным поиск в диапазоне $\left[\frac{\|f(x_k)\|}{L}; 20\frac{\|f(x_k)\|}{L}\right]$, т. е. $\alpha \in \left[\frac{1}{L}; \frac{20}{L}\right]$.

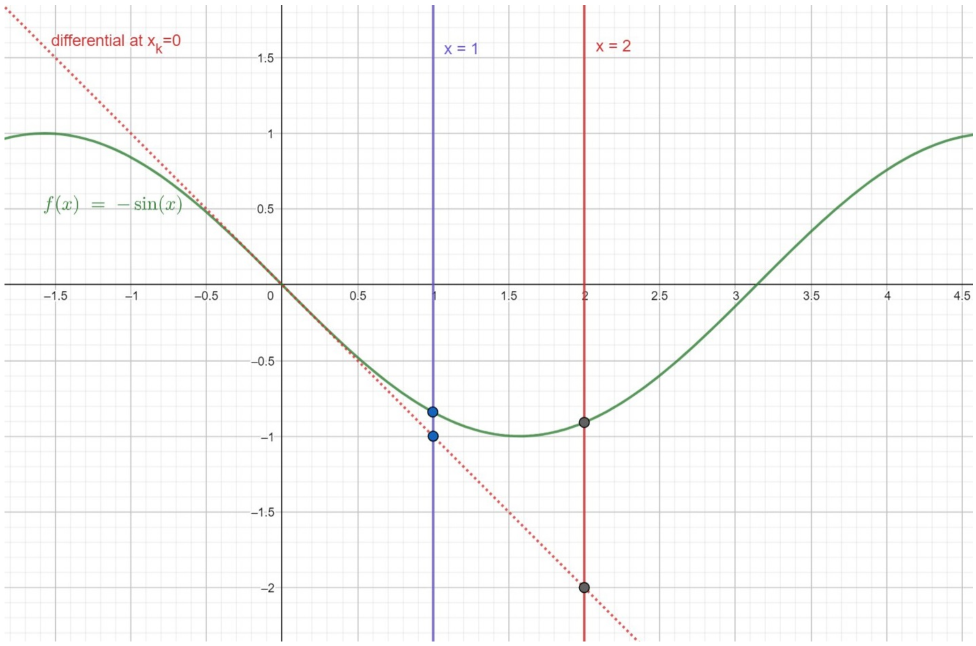

Рис. 1: Пример выбора длины начального интервала в методе золотого сечения

Длина желаемого интервала неопредённости, до которого нужно сузить начальный, должна быть такой, чтобыв итоге достичь условия

$$\|\nabla f(x_k)\|^2 \leq \epsilon \tag{5}$$

при $k \to \infty$. Для этого достаточно локализовать точку минимума x_k^* одномерной функции с точностью $\frac{\varepsilon}{L}$. Такой выбор позволяет, двигаясь в направлении точки с $\nabla f = 0$, гарантированно попасть в $x_k + 1$ такую,что условие (5) будет выполнено.

3 Описание алгоритмов

3.1 Метод наискорейшего спуска

Важнейший элемент градиентного метода первого порядка - выбор параметра α. Широко используется вариант выбора шага, при котором α находится в рузультате решения задачи одномерной минимизации, то есть из условия:

$$f(x_k - \alpha_k \cdot \nabla f(x_k)) = min f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)), \alpha \geq 0.$$

Algorithm 1: Метод наискорейшего спуска

Data: $eps > 0$ - параметр, характеризующий условие окончания вычислений;
x_0 - начальное приближение.

Result: x_{min} - значение аргумента, удовлетворяющее условию $||\nabla f(x_k)||^2 < eps$.

1 k := 0;
2 **do**
3   Вычисляем $\nabla f(x_k)$;
4   Определяем $\alpha_k := \arg\min_\alpha f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)), \alpha \geq 0$;
5     $x_{k+1} := x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$;
6     $k := k + 1$;
7 **while** $||\nabla f(x_k)||^2 \geq eps$;

Заметим, что строка 4 - основной шаг алгоритма (2), ведь тут вычисляется параметр α_k. Здесь мы воспользуемся методом одномерной минимизации Золотого Сечения, который подробно описан нами в предыдущей ЛР.

3.2 Метод Ньютона

Проверим условия выполнимости теорем, представленных ниже:

Теорема: (1)

Если ф. $f(x)$ удовлетворяет условиям:

└ сильно выпукла

$$m\|y\|^2 \le y^T H(x) y \le M\|y\|^2, \quad 0<m<M$$

то классический вариант метода Ньютона, отвечающий выбору по формуле:

└ шаг равен единице

$$f(x) - f(x_k) \le \varepsilon \alpha_k \nabla^T f(x_k) d_k$$

└ $x_k + \alpha_k d_k$

сходится к точке минимума x_* с квадратичной скоростью

$$\|x_{k+1} - x_*\| \le C\|x_k - x_*\|^2, \quad k = 0, 1, \dots$$

вне зависимости от начального приближения x_0

Более того, если $H(x)$ удовлетворяет еще и усл. Липшица: $\|H(x_1) - H(x_2)\| \le L\|x_1 - x_2\|$, где $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$

то $C = \frac{L}{m}$

Теорема: (2)

Если $f(x)$ удовлетворяет всем усл. теоремы (1), то метод Ньютона сходится к x_* не зависимо от начального приближения с квадратичной скоростью, опр. следующими соотношениями

$$\|x^{(N+i)} - x_*\| \le \frac{L}{m}\omega_N$$

, где α: $f(x) - f(x_k) \le \varepsilon \alpha \nabla^T f(x_k) d_k$ (1)

$$\omega_N = \frac{L}{m}\|x^{(N)} - x_*\|$$

, где α: $f(x_k - \alpha_k (H(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)) = \min\limits_{\alpha \ge 0} f(x_k - \alpha (H(x_k))^{-1} \nabla f(x_k))$ (2)

$$\omega_N = \|x_{k+1} - x_*\| \le \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} \frac{L}{m}\|x_k - x_*\|^2$$

На практике был реализован классический метод Ньютона: $\alpha = 1$

Проверим:

$$m\|y\|^2 \le y^T H(x) y \le M\|y\|^2, \quad 0<m<M$$ (условие сильной выпуклости)

$$H(x) = \begin{bmatrix} 2 - \cos(x_1 + 3x_2) & -3\cos(x_1 + 3x_2) \\ -3\cos(x_1 + 3x_2) & 2 - 9\cos(x_1 + 3x_2) \end{bmatrix}$$

Проведём численный эксперимент, для того, чтобы определить m и M

Будем брать точки из окрестности точки минимума и проверять неравенство

Получим следующий результат:

$m = 1.2926$

$M = 12$

при $x_1 \in [0.2; 0.6]$, $x_2 \in [-1.3; 1.7]$

таким образом, условие теорем выполнено

Алгоритм:

1. Выберем начальное приближение x и точность ε
2. Если $\|\nabla f(x^{(0)})\|^2 < \varepsilon$, завершить процесс
3. Положим $K = 1$
4. Вычислим значения производной функции в точке $x^{(k)}$
5. Вычислим коэффициенты матрицы Гессе в точке $x^{(k)}$
6. Вычислим det матрицы Гессе в точке x
7. $x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - \frac{1}{\det} \cdot (F_{22}F_1 - F_{21}F_2)$

   $x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - \frac{1}{\det} \cdot (F_{11} \cdot F_2 - F_{12}F_1)$
8. Если $\|\nabla f(x_k)\|^2 < \varepsilon$, завершить процесс, иначе $K = K+1$ и перейти к пункту 4.

$$H = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{bmatrix} \qquad F_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$F_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

4 Результаты решения задачи

Оба алгоритма были запущены с начальным приближением $x_0 = \begin{pmatrix} -5.0 \\ -1.5 \end{pmatrix}$ и критерием остановки вычислений $\epsilon = 0.01$. Результаты проиллюстрированы графиками:

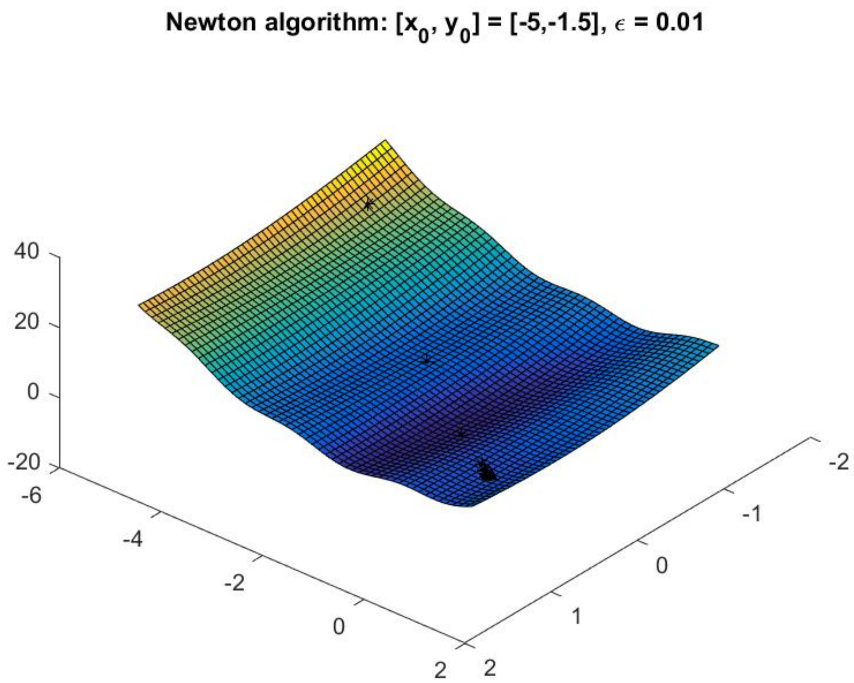

Рис. 2: Вычисление минимума методом Ньютона 2 порядка

Алгоритм Ньютона сошёлся к точке $\begin{pmatrix} 0.95 \\ 0.35 \end{pmatrix}$ с нормой $\|\nabla f\|^2 < \varepsilon$ за 18 шагов, а метод наискорейшего спуска – к элементу $\begin{pmatrix} 0.44 \\ -1.15 \end{pmatrix}$ за 263 итерации. По рисункам видны некоторые особенности в работе методов:

- Алгоритм наискорейшего спуска, в отличие от метода Ньютона, не пропускает локальные минимумы (что согласуется с требованиями, которые предъявлены к алгоритму поиска шага метода)
- В случае наискорейшего спуска при подходе к точке минимума шаги становятся реже (что обусловлено расширением диапазона, в котором выбираем x_{k+1}, при уменьшении нормы градиента), а в методе Ньютона – чаще.
- Метод Ньютона выполнил меньше итераций, что согласуется с данными о более высокой скорости сходимости по сравнению с градиентными методами первого порядка [1].

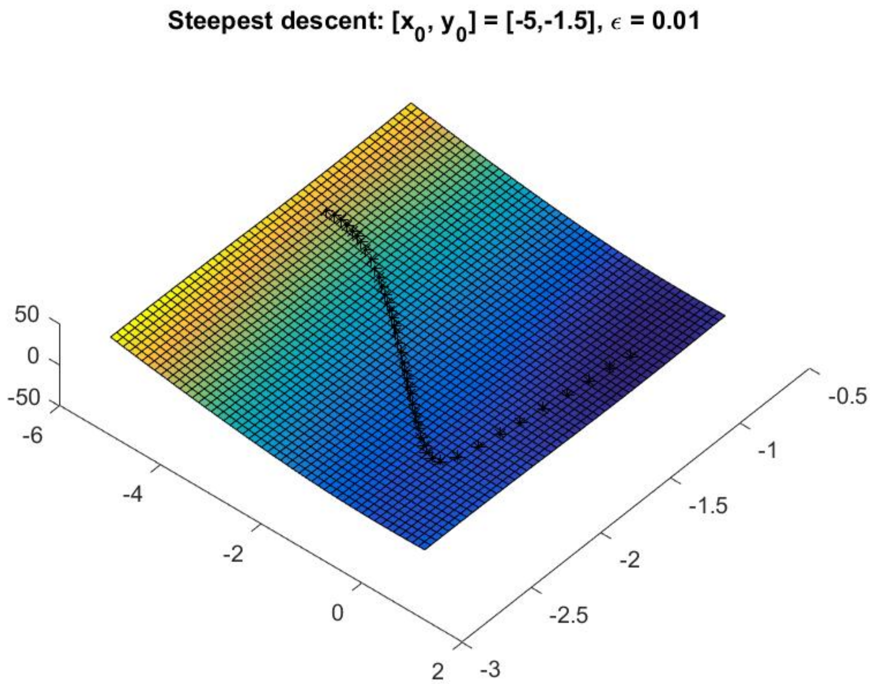

Рис. 3: Вычисление минимума методом наискорейшего спуска

5 Оценка достоверности результата

Ранее в пункте 2 было доказано, что алгоритм наискорейшего спуска всегда сходится к точке, где выполнено условие окончания итераций (5).
Проведён дополнительный вычислительный эксперимент: алгоритм запущен несколько раз с разными начальными точками. Результаты сведены в таблицу.

Таблица 1: Результаты поиска минимума методом наискорейшего спуска

стартовая точка	$x^{(1)}_{stop}$	$x^{(2)}_{stop}$	число итераций	$\|\nabla f(x_{stop})\|^2$
$[-5.0; -1.5]$	0.441	-1.158	263	0.0098
$[0.0; 0.0]$	0.444	-1.160	556	0.0098
$[-5.0; -5.0]$	0.451	-1.162	2844	0.0095
$[1.15; 0.29]$	0.956	0.353	77	0.0098
$[1.5; 0.5]$	0.956	0.353	261	0.0095

Видно, что алгоритм при разных начальных приближениях сходится к разным точкам оптимума, но всякий раз достигает точки, в которой выполнено условие (5).

Список литературы

[1] Методы оптимизации. Математическое программирование: учеб. пособие. / Ю.Я. Болдырев, Е.А. Родионова; С.-Петерб. гос. техн. ун-т. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. – 81 с.: ил.

6 Ответы на вопросы

Вопрос. Почему выбран квадрат нормы градиента функции цели в условии окончания?
Ответ. Для выхода из итерационного процесса могут быть использованы два равносильных условия:

$$\|\nabla f\| \le \varepsilon \tag{6}$$

$$\|\nabla f\|^2 \le \bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon} = \varepsilon^2 \tag{7}$$

Если выбрана первая или бесконечная норма, т. е. $\|\vec{x}\|_1 := \sum_{k=1}^{n} x_k$ или $\|\vec{x}\|_\infty := \max x_k$, для упрощения вычислений легче пользоваться критерием (6). Если вторая норма $\|\vec{x}\|_2 := \sqrt{\sum_{k=1}^{n} x_k^2}$, то с точки зрения вычислений проще пользоваться критерием (7), что и осуществлено в данной работе.

Вопрос. Поясните подробнее вычислительный эксперимент для получения оценок m, M : $m\|y\|^2 \le y^T H(x) y \le M \|y\|^2 \forall y \in \mathbb{R}^n \forall x \in S$, где $S \subset \mathbb{R}^n$ – множество, на котором ищем m, M
Ответ. Заметим, что

$$m = \inf_{\|y=1\|=1, x\in S} \left\|y^T H(x) y\right\|$$

$$M = \sup_{\|y=1\|=1, x\in S} \left\|y^T H(x) y\right\|$$

Множество S удобно задать прямоугольником. Тогда алгоритм численного поиска таков. Рассматриваем двумерный случай. Пусть $h_{11}(\vec{x}), h_{12}(\vec{x}) = h_{21}(\vec{x}), h_{22}(\vec{x})$ – коэффициенты матрицы Гессе, $S = [\vec{a}; \vec{b}]$. Зададим малые числа $\delta_1, \delta_2, \delta_\phi$

$m := \infty$;
$M := -\infty$;
for $x_1 = a_1; x_1 \leq b_1; x_1+ = \delta_1$ **do**
    for $x_2 = a_2; x_2 \leq b_2; x_2+ = \delta_2$ **do**
        for $\phi = 0; \phi \leq 2 * \pi; \phi+ = \delta_\phi$ **do**
            $y := y = \begin{pmatrix} \cos(\phi) \\ \sin(\phi) \end{pmatrix}$;
            $H := y^T H \left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) y$;
            if $m > H$ **then**
                $m = H$;
            end
            if $M < H$ **then**
                $M = H$;
            end
        end
    end
end

Поскольку производные h_{11}, h_{12}, h_{22} ограниченны, то с измельчением частот дискретизации $\delta_1, \delta_2, \delta_\phi$ точность вычисления m, M возрастает.