

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет прикладной математики – процессов управления

М. Э. АББАСОВ

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Учебное пособие

Санкт-Петербург
2014

УДК 519.85

ББК 22.18

А 13

Рецензенты: докт. физ.-мат. наук, проф. *Л. Н. Полякова*
(Санкт-Петербургский государственный университет),
докт. физ.-мат. наук, проф. *В. И. Ерохин* (Санкт-Петербургский государственный технологический институт)

Печатается по постановлению Редакционно – издательского совета факультета прикладной математики – процессов управления Санкт-Петербургского государственного университета

Аббасов М. Э.

А 13 Методы оптимизации: Учеб. пособие / Аббасов М. Э.
— СПб.: Издательство “ВВМ”, 2014. — 64 с.

ISBN 978-5-9651-0875-6

Настоящее пособие содержит материалы практических занятий курса “Методы оптимизации”, читаемого на факультете прикладной математики – процессов управления Санкт-Петербургского государственного университета. Рассматриваются разделы: одномерная и многомерная безусловная оптимизация, условная оптимизация. В каждом разделе приведен необходимый минимум теоретических сведений, разобраны примеры. Целью данного пособия является первоначальное знакомство читателя с алгоритмами оптимизации, а также формирование у него понимания идейных основ этих алгоритмов. Поэтому во многих местах пришлось пожертвовать строгими обоснованиями и доказательствами для как можно более простого, но интуитивно понятного изложения материала.

Для студентов и аспирантов, специализирующихся в области теории математического моделирования, оптимизации и математического программирования.

Библиогр. 11 назв.

УДК 519.85

ББК 22.18

Работа над пособием осуществлялась при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант №12-01-00752, а также при поддержке гранта СПбГУ 9.38.205.2014.

ISBN 978-5-9651-0875-6

© М. Э. Аббасов, 2014

ОГЛАВЛЕНИЕ

Обозначения и условные знаки	4
Глава 1. Вспомогательные сведения	5
§ 1.1. Экстремум.....	5
Глава 2. Одномерная минимизация	7
§ 2.1. Постановка задачи. Унимодальные функции.....	7
§ 2.2. Методы нулевого порядка.....	7
§ 2.3. Методы более высокого порядка.....	16
Глава 3. Многомерная минимизация	21
§ 3.1. Метод покоординатного спуска.....	21
§ 3.2. Градиентные методы.....	23
§ 3.3. Ускоренные градиентные методы.....	29
§ 3.4. Метод сопряженных направлений.....	32
§ 3.5. Метод Ньютона.....	39
§ 3.6. Квазиньютоновский метод с поправкой ранга 1.....	41
§ 3.7. Численный эксперимент.....	44
Глава 4. Условная оптимизация	47
§ 4.1. Условия Куна-Таккера.....	47
§ 4.2. Метод внешних штрафов.....	50
§ 4.3. Метод внутренних штрафов.....	56
§ 4.4. Метод условного градиента.....	59
Литература	64

ОБОЗНАЧЕНИЯ И УСЛОВНЫЕ ЗНАКИ

\mathbb{R}^n — евклидово n -мерное пространство

$\text{int}X$ — внутренность множества X

$B_\delta(y)$ — δ -окрестность точки y ($\{x: \|x - y\| \leq \delta\}$)

$\overline{1, k}$ — множество натуральных чисел от 1 до k

$A = [a_{ij}]_{i,j=1}^n$ — квадратная $(n \times n)$ -матрица с элементами a_{ij}

A^T — транспонированная матрица A

$x = (x_1, \dots, x_n)^T$ — вектор-столбец

$\mathbf{0} = (0, \dots, 0)^*$ — нулевой вектор в \mathbb{R}^n

$f'(x)$ — градиент функции f в точке x

$f''(x)$ — матрица Гессе функции f в точке x

ГЛАВА 1. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ

§ 1.1. Экстремум

Пусть X – некоторое множество из \mathbb{R}^n , и пусть задана непрерывная функция $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Определение 1.1. Точку x_* называют точкой глобального минимума функции $f(x)$ на множестве X , если $f(x_*) \leq f(x)$ для всех $x \in X$.

Определение 1.2. Точку x_* называют точкой локального минимума функции $f(x)$ на множестве X , если существует такое $\delta > 0$, что $f(x_*) \leq f(x)$ для всех $x \in B_\delta(x_*) \cap X$.

Далее мы будем рассматривать задачу минимизации $f(x)$ на X , то есть задачу отыскания точек минимума функции $f(x)$ на множестве X . Если множество X замкнуто и ограничено, то по теореме Вейерштрасса минимум на нем достигается.

Определение 1.3. Точку x_* называют точкой глобального максимума функции $f(x)$ на множестве X , если $f(x_*) \geq f(x)$ для всех $x \in X$.

Определение 1.4. Точку x_* называют точкой локального максимума функции $f(x)$ на множестве X , если существует такое $\delta > 0$, что $f(x_*) \geq f(x)$ для всех $x \in B_\delta(x_*)$.

Из определений ясно, что любая точка глобального минимума или максимума является так же и точкой локального минимума или максимума соответственно, поэтому впредь, если не оговорено иное, минимум будет пониматься в локальном смысле. Так как

$$\max_{x \in X} f(x) = -\min_{x \in X} (-f(x)),$$

то задача максимизации $f(x)$ на X аналогична задаче минимизации $-f(x)$ на X , поэтому ограничимся изучением лишь задач минимизации. Совокупность всех точек минимума и максимума функции на множестве X будем называть точками экстремума. Если в вышеизложенных определениях заменить нестрогие неравенства на строгие, то получим определения строгого экстремума.

Изучение начнем со случая $X = \mathbb{R}^n$ – поиска (локального) минимума f на всем пространстве, то есть задачи безусловной минимизации.

Первая глава посвящена методам одномерной ($f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$) безусловной минимизации.

Далее во второй главе рассматриваются методы решения задачи многомерной безусловной оптимизации, которые, по сути, сводят задачу к последовательности задач одномерной минимизации.

Третья глава посвящена обсуждению задачи условной оптимизации ($X \neq \mathbb{R}^n$). Здесь выводятся необходимые условия Куна-Таккера и предлагаются методы сводящие, эту задачу к последовательности задач безусловной минимизации.

Список литературы включает 11 наименований.

ГЛАВА 2. ОДНОМЕРНАЯ МИНИМИЗАЦИЯ

§ 2.1. Постановка задачи. Унимодальные функции.

Для нахождения оптимума функции n переменных x_1, \dots, x_n обычно используют итеративные методы, требующие на каждой итерации решения оптимизационной задачи с одним переменным: найти $\alpha > 0$ минимизирующее функцию $h(\alpha) = f(x^0 + \alpha g)$, где g – направление спуска, то есть направление, вдоль которого наша функция гарантированно убывает при достаточно малых α . Именно поэтому изучение методов оптимизации начнем с самого простого случая – минимизации функции скалярного аргумента, то есть $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Определение 2.1. Говорят, что функция f унимодальна на действительном отрезке $[a, b]$, если она имеет минимум $x_* \in [a, b]$ и если для любых $\alpha, \beta \in [a, b]$ ($\alpha < \beta$) выполняются соотношения

$$f(\alpha) > f(\beta) \text{ при } \beta \leq x_*,$$

$$f(\alpha) < f(\beta) \text{ при } \alpha \geq x_*.$$

Известный из курса математического анализа прием нахождения решения уравнения $f'(x) = 0$ на практике не всегда применим. Во-первых функция может быть недифференцируемой, а во-вторых само решение указанного уравнения может оказаться весьма сложным. В связи с этим особое значение приобретают методы нулевого порядка, не требующие вычисления производной. Они, как правило, применяются к унимодальным на рассматриваемом отрезке функциям.

§ 2.2. Методы нулевого порядка.

Далее будем рассматривать нашу функцию на фиксированном отрезке $[a, b]$.

Метод пассивного поиска. Это самый простой метод, предлагающий разделить отрезок $[a, b]$ на k равных частей точками

$$x_i = a + \frac{b-a}{k}i, \quad i = \overline{0, k},$$

сравнить значения $f(x_i)$, $i = \overline{0, k}$ и найти

$$x_m : f(x_m) = \min_{i=\overline{0, k}} f(x_i).$$

Ясно, что точка минимума так будет найдена с погрешностью

$$\varepsilon \geq \frac{b-a}{k}.$$

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = x + \frac{2}{x}$, $[a, b] = [0.5, 3.5]$, и пусть нужно найти минимум с погрешностью $\varepsilon \leq 1/2$. Получаем $k \geq \frac{b-a}{\varepsilon} = 6$. Таким образом:

Номер индекса i	0	1	2	3	4	5	6
Значение аргумента x_i	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5
Значение функции $f(x_i)$	4.5	3	2.83	3	3.3	3.67	4.07

Откуда $x_m = x_2 = 1.5$, а т.к. $\varepsilon \leq 0.5$, то для истинной точки минимума можем гарантировать $x_* \in [1, 2]$, что верно, ведь $x_* = \sqrt{2}$.

Отметим, что в этом методе все $n + 1$ точек выбираются заранее и для более эффективного поиска минимума лучше использовать методы последовательного поиска, в которых для вычисления очередной точки x_i используется информация, полученная на более ранней стадии расчетов. К таким методам относится метод половинного деления или дихотомии.

Метод дихотомии. В этом методе на каждой итерации будем получать отрезок, содержащий точку минимума (локализирующий отрезок), так, что длина каждого следующего отрезка меньше длины предыдущего. Итак, вначале примем $a_1 = a$, $b_1 = b$, выберем некоторое положительное число $\delta > 0$ и вычислим

$$c_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} - \frac{\delta}{2}, \quad d_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} + \frac{\delta}{2}.$$

Далее, получив значения функции f в точках c_1 , d_1 , сравниваем их.

Если $f(c_1) \leq f(d_1)$, то $a_2 = a_1$, $b_2 = d_1$.

Если же $f(c_1) > f(d_1)$, то $a_2 = c_1$, $b_2 = b_1$.

Далее берем

$$c_2 = \frac{a_2 + b_2}{2} - \frac{\delta}{2}, \quad d_2 = \frac{a_2 + b_2}{2} + \frac{\delta}{2}$$

и опять сравниваем $f(c_2)$ с $f(d_2)$, определяя новые значения a_3 , b_3 и т.д. до тех пор, пока не выполнится $\varepsilon_i = \frac{b_i - a_i}{2} \leq \varepsilon$, где ε - требуемая погрешность определения точки минимума.

Название метода связано с тем, что при малых δ длины локализующих интервалов на каждом шаге уменьшаются почти в два раза. Понятно, что выбирая $x_m = \frac{a_i + b_i}{2}$ получим точку минимума с погрешностью $\varepsilon_i = \frac{b_i - a_i}{2}$. Заметим, что с одной стороны выбор достаточно малого δ гарантирует быстрое сокращение длины локализующего отрезка, но с другой стороны при этом приходится вычислять значение функции с большей точностью (большим количеством значащих знаков после запятой), так как иначе можно «пропустить» точку минимума. В рамках изложенного алгоритма это означает, что возможна ситуация, когда точка минимума расположена в интервале (d_i, b_i) , но из-за недостаточно точного вычисления значения функции в точках c_i, d_i принимается $f(c_i) = f(d_i)$, в то время, как на самом деле $f(c_i) > f(d_i)$. Таким образом, новый локализующий отрезок имеет вид $[a_i, d_i]$ и, очевидно, не содержит точку минимума.

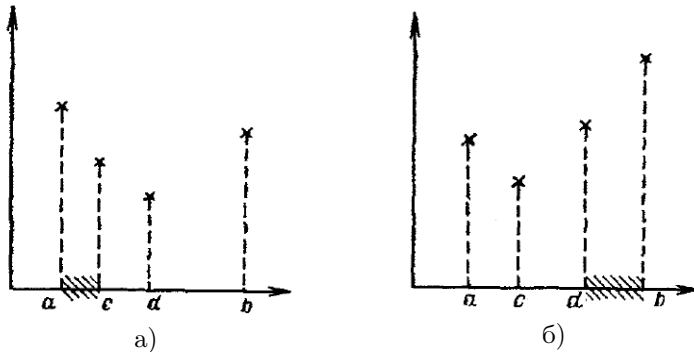


Рисунок 2.1: Определение локализующего отрезка для унимодальной функции (штриховкой показана отбрасываемая часть отрезка)

Выгода рассмотренного подхода очевидна – в отличие от пассивного поиска, в методе дихотомии не требуется вычислять значения функции в точках, принадлежащих отбрасываемым на каждом шаге полуинтервалам.

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = x + \frac{2}{x}$, $a = 0.5$, $b = 3.5$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.5$. Пусть $\delta = 0.1$, тогда

1. $a_1 = 0.5$, $b_1 = 3.5$,
 $c_1 = \frac{0.5+3.5}{2} - \frac{0.1}{2} = 1.95$, $d_1 = \frac{0.5+3.5}{2} + \frac{0.1}{2} = 2.05$,
 $f(c_1) = 2.976 < f(d_1) = 3.026$;
2. $a_2 = a_1 = 0.5$, $b_2 = d_1 = 2.05$, $\varepsilon_2 = \frac{2.05-0.5}{2} = 0.775 > 0.5$,
 поэтому продолжаем.
 $c_2 = \frac{0.5+2.05}{2} - \frac{0.1}{2} = 1.225$, $d_2 = \frac{0.5+2.05}{2} + \frac{0.1}{2} = 1.325$,
 $f(c_2) = 2.858 > f(d_2) = 2.834$;
3. $a_3 = c_2 = 1.225$, $b_3 = d_2 = 2.05$, $\varepsilon_3 = \frac{2.05-1.225}{2} = 0.4125 < 0.5$,
 следовательно это последняя итерация. Принимаем
 $x_m = \frac{2.05+1.225}{2} = 1.638$.

Заметим, что метод дихотомии позволил для получения точки минимума с заданной погрешностью обращаться к вычислению значения функции четыре раза, вместо семи в методе пассивного поиска.

Задания

1. В изложенном алгоритме при $f(c_i) = f(d_i)$ предлагается принять $a_{i+1} = a_i$, $b_{i+1} = d_i$. Какие есть еще варианты построения локализующего отрезка $[a_{i+1}, b_{i+1}]$ в этом случае?
2. Показать, что погрешность $\varepsilon_i = \frac{b-a-\delta}{2^i} + \frac{\delta}{2}$

Метод золотого сечения. Более обдуманый подход к процессу поиска точки минимума позволил сэкономить на количестве обращений к вычислению функции. Однако в методе дихотомии имеется особенность, позволяющая строить более эффективные алгоритмы. На каждой итерации приходится вычислять

значение функции в двух новых точках c_i и d_i . Если удастся построить алгоритм так, чтобы каждый раз одна из этих точек совпадала с одной из аналогичных точек с предыдущей итерации, т.е. c_{i-1} или d_{i-1} , то это бы позволило на каждой итерации вычислять значение функции лишь в одной новой точке и, тем самым, обращаться к вычислению функции еще меньше.

Оказывается, это можно сделать с помощью деления отрезка в пропорциях золотого сечения. Напомним, что отрезок AB (см. рис. 2.2) разделен точкой D в пропорции золотого сечения, если отношение всей длины отрезка к длине большей его части равно отношению длины большей его части к длине меньшей, т.е.

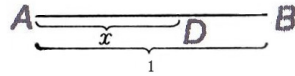


Рисунок 2.2: Золотое сечение, т.е.

$$\frac{AB}{AD} = \frac{AD}{DB}.$$

Пусть длина $AB = 1$, а $AD = x$. Тогда

$$\frac{1}{x} = \frac{x}{1-x},$$

откуда $x = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$. Понятно, что больший отрезок можно было бы отложить не от левого, а от правого конца отрезка. Тогда получили бы точку золотого сечения C , симметричную т. D относительно центра, и $AC = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$.

Точку C называют первой, а D второй точкой золотого сечения. Эти точки обладают замечательными свойствами (см. рис. 2.3):



Рисунок 2.3: Первая и вторая точка золотого сечения

Точка C не только первая точка золотого сечения отрезка AB , но и вторая точка золотого сечения для отрезка AD ;

точка D не только вторая точка золотого сечения отрезка AB , но и первая точка золотого сечения отрезка CB .

Поэтому использование точек золотого сечения для определения границ локализирующих отрезков позволяет на каждой итерации

вычислять значение функции лишь в одной новой точке.

Итак, опишем сам алгоритм.

На первой итерации принимаем $a_1 = a$, $b_1 = b$ и вычисляем

$$c_1 = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_1 - a_1) + a_1, \quad d_1 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b_1 - a_1) + a_1.$$

Далее, получив значения функции f в точках c_1 , d_1 , сравниваем их.

Если $f(c_1) \leq f(d_1)$, то $a_2 = a_1$, $b_2 = d_1$, $d_2 = c_1$,
 $c_2 = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_2 - a_2) + a_2$;

Если же $f(c_1) > f(d_1)$, то $a_2 = c_1$, $b_2 = b_1$, $c_2 = d_1$,
 $d_2 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b_2 - a_2) + a_2$.

Далее сравниваем $f(c_2)$ с $f(d_2)$, определяя новые значения a_3 , b_3 , и т.д. до тех пор, пока не выполнится $\varepsilon_i = \frac{b_i - a_i}{2} \leq \varepsilon$, где ε - требуемая точность. На каждой итерации длина локализующего отрезка уменьшается в $\frac{\sqrt{5} - 1}{2}$ раз, следовательно

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^{i-1} (b - a).$$

Пример. Рассмотрим ту же функцию

$$f(x) = x + \frac{2}{x},$$

$a = 0.5$, $b = 3.5$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.5$.

1. $a_1 = 0.5$, $b_1 = 3.5$,

$$c_1 = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(3.5 - 0.5) + 0.5 = 1.646,$$

$$d_1 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(3.5 - 0.5) + 0.5 = 2.354,$$

$$f(c_1) = 2.861 < f(d_1) = 3.204;$$

2. $a_2 = a_1 = 0.5$, $b_2 = d_1 = 2.354$, $d_2 = c_1 = 1.646$,

$$\varepsilon_2 = \frac{2.354 - 0.5}{2} = 0.927 > 0.5, \text{ поэтому продолжаем. } c_2 =$$

$$\frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b_2 - a_2) + a_2 = 1.208,$$

$$f(c_2) = 2.864, \quad f(d_2) = f(c_1) = 2.861,$$

$$f(c_2) > f(d_2);$$

3. $a_3 = c_2 = 1.208$, $b_3 = b_2 = 2.354$, $c_3 = d_2 = 1.646$,
 $\varepsilon_2 = \frac{2.354-1.208}{2} = 0.573 > 0.5$, поэтому продолжаем. $d_3 =$
 $\frac{\sqrt{5}-1}{2}(b_3 - a_3) + a_3 = 1.916$,
 $f(c_3) = f(d_2) = 2.861$, $f(d_3) = 2.96$,
 $f(c_3) < f(d_3)$;
4. $a_4 = a_3 = 1.208$, $b_4 = d_3 = 1.916$, $d_4 = c_3 = 1.646$,
 $\varepsilon_2 = \frac{1.916-1.208}{2} = 0.354 < 0.5$, т.о. это последняя итерация.
 Принимаем $x_m = \frac{1.916+1.208}{2} = 1.562$.

Задания

1. Почему первая точка золотого сечения отрезка AB (см. рис. 2.3) является второй точкой золотого сечения для отрезка AD ?
2. Почему вторая точка золотого сечения отрезка AB (см. рис. 2.3) является первой точкой золотого сечения для отрезка CB ?

Метод Фибоначчи. Обозначенную в начале предыдущего пункта идею можно реализовать также с помощью чисел Фибоначчи. Напомним, как они определяются:

$$F_1 = 1, F_2 = 1, F_{n+2} = F_n + F_{n+1}, n \geq 1.$$

Приняв

$$c_1 = a_1 + (b_1 - a_1) \frac{F_n}{F_{n+2}},$$

$$d_1 = a_1 + (b_1 - a_1) \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}},$$

где n – некоторое натуральное число, большее единицы, получим две симметричные относительно центра отрезка точки. Действительно, они равноудалены от концов отрезка, так как

$$c_1 - a_1 = (b_1 - a_1) \frac{F_n}{F_{n+2}} = (b_1 - a_1) \left(1 - \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}\right) = b_1 - d_1.$$

Далее, сравнив значения $f(c_1)$ с $f(d_1)$ нужно отбросить один из полуинтервалов $[a_1, c_1]$ или $(d_1, b_1]$.

Если $f(c_1) \leq f(d_1)$ отбрасываем $(d_1, b_1]$. Точку c_1 принадлежащая новому локализирующему отрезку $[a_2, b_2] = [a_1, d_1]$ будет делить его в соотношении

$$\frac{c_1 - a_1}{d_1 - a_1} = \frac{\frac{F_n}{F_{n+2}}}{\frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}} = \frac{F_n}{F_{n+1}}.$$

Поэтому в этом случае $d_2 = a_2 + (b_2 - a_2)\frac{F_n}{F_{n+1}} = c_1$.

Если $f(c_1) > f(d_1)$ отбрасываем $[a_1, c_1]$. Точку d_1 принадлежащая новому локализирующему отрезку $[a_2, b_2] = [c_1, b_1]$ будет делить его в соотношении

$$\frac{d_1 - c_1}{b_1 - c_1} = \frac{d_1 - c_1}{d_1 - a_1} = \frac{\frac{F_{n+1}}{F_{n+2}} - \frac{F_n}{F_{n+2}}}{\frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}} = \frac{F_{n-1}}{F_{n+1}}.$$

Поэтому в этом случае $c_2 = a_2 + (b_2 - a_2)\frac{F_{n-1}}{F_{n+1}} = d_1$.

Таким образом положив $a_1 = a$, $b_1 = b$,

$$c_i = a_i + (b_i - a_i)\frac{F_{n+1-i}}{F_{n+3-i}},$$

$$d_i = a_i + (b_i - a_i)\frac{F_{n+2-i}}{F_{n+3-i}},$$

на каждой итерации опять будем вычислять значение функции только в одной новой точке. Кроме того, так как

$$b_2 - a_2 = (b_1 - a_1)\frac{F_{n+1}}{F_{n+2}},$$

$$b_3 - a_3 = (b_2 - a_2)\frac{F_n}{F_{n+1}} = (b_1 - a_1)\frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}\frac{F_n}{F_{n+1}} = (b_1 - a_1)\frac{F_n}{F_{n+2}},$$

и вообще

$$b_i - a_i = (b_1 - a_1)\frac{F_{n+3-i}}{F_{n+2}},$$

то

$$b_n - a_n = (b_1 - a_1)\frac{F_3}{F_{n+2}}.$$

Отсюда получаем, что для определения решения с погрешностью, не превосходящей ε , нужно n выбрать из условия

$$(b - a) \frac{F_3}{F_{n+2}} \leq 2\varepsilon,$$

т.е

$$F_{n+2} \geq \frac{(b - a)}{\varepsilon}.$$

Пример. Возьмем функцию $f(x) = x + \frac{2}{x}$, $a = 0.5$, $b = 3.5$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.5$. Из условия (2.2) $F_{n+2} \geq 6$, откуда $n \geq 4$.

1. Итак, примем $n = 4$, $a_1 = 0.5$, $b_1 = 3.5$,

$$c_1 = 0.5 + (3.5 - 0.5) \frac{F_4}{F_6} = 0.5 + 3 \frac{3}{8} = 1.625,$$

$$d_1 = 0.5 + (3.5 - 0.5) \frac{F_5}{F_6} = 0.5 + 3 \frac{5}{8} = 2.375,$$

$$f(c_1) = 2.856 < f(d_1) = 3.217;$$

2. $a_2 = a_1 = 0.5$, $b_2 = d_1 = 2.375$, $d_2 = c_1 = 1.625$,

$$c_2 = 0.5 + (2.375 - 0.5) \frac{F_3}{F_5} = 0.5 + 1.875 \frac{2}{5} = 1.25,$$

$$f(c_2) = 2.85, f(d_2) = f(c_1) = 2.856,$$

$$f(c_2) < f(d_2);$$

3. $a_3 = a_2 = 0.5$, $b_3 = d_2 = 1.625$, $d_3 = c_2 = 1.25$,

$$c_3 = 0.5 + (1.625 - 0.5) \frac{F_2}{F_4} = 0.5 + 1.125 \frac{1}{3} = 0.875$$

$$f(c_3) = 3.161, f(d_3) = f(c_2) = 2.85,$$

$$f(c_3) > f(d_3);$$

4. $a_4 = c_3 = 0.875$, $b_4 = b_3 = 1.625$, $c_4 = d_3 = 1.25$

$$d_4 = 0.875 + (1.625 - 0.875) \frac{F_2}{F_3} = 0.875 + 0.75 \frac{1}{2} = 1.25.$$

Принимаем $x_m = c_4 = d_4 = \frac{1.625 + 0.875}{2} = 1.25$ и завершаем расчеты. Как видим, $\varepsilon_2 = \frac{1.625 - 0.875}{2} = 0.375 < 0.5$.

В отличие от методов дихотомии и золотого сечения в методе Фибоначчи не нужно на каждом шаге проверять критерий остановки (условие $b_i - a_i \leq 2\varepsilon$). Количество шагов здесь задается заранее.

Отметим, что описанный выше алгоритм является упрощенной версией метода Фибоначчи и приведен лишь для разъяснения его идейных основ. Полноценный же метод Фибоначчи более эффективен, чем метод золотого сечения, в том смысле, что позволяет за одно и то же количество обращений к вычислению функции в конечном счете получить локализирующий отрезок меньшей длины. Это может быть важно, когда вычисление функции связано с дорогостоящими физическими опытами либо сама функция имеет сложный вид, что делает ее вычисление трудоемким.

В рассмотренных примерах (отыскания точки минимума одной и той же функции с одной и той же точностью) при применении метода дихотомии пришлось вычислять значение функции шесть раз, метода золотого сечения и упрощенного варианта метода Фибоначчи – четыре раза.

Задания

1. *Какой результат будет получен, если применить метод дихотомии, золотого сечения или Фибоначчи к функциям, не являющимся унимодальными на рассматриваемом отрезке?*

§ 2.3. Методы более высокого порядка.

Идеи всех методов, которые будут рассматриваться в данном пункте основаны на поиске стационарных точек, т.е. таких точек, в которых выполнено необходимое условие минимума

Теорема 2.1. Пусть $f(x)$ гладкая функция, заданная на \mathbb{R}^n , тогда если x_* – т. экстремума, то $f'(x_*) = 0$.

Метод касательных. Начнем с метода первого порядка, то есть такого, который использует производную рассматриваемой функции.

Определение 2.1. Функция $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ называется выпуклой на отрезке $[a, b]$, если для любого $\alpha \in [0, 1]$ и любых x_1, x_2 из $[a, b]$ выполняется

$$f(\alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1 - \alpha)f(x_2).$$

Пусть функция $f(x)$ выпукла и дифференцируема на отрезке $[a, b]$. Если $f'(a) \geq 0$ или $f'(b) \leq 0$, то т. a либо т. b является точкой минимума соответственно, и тогда задача решена, поэтому пусть $f'(a) < 0$, $f'(b) > 0$. Примем $a_1 = a$, $b_1 = b$.

Далее строим касательные к графику $f(x)$ в точках a_1 и b_1 и находим точку их пересечения. Обозначим ее c_1 .

Если $f'(c_1) > 0$, то принимаем $a_2 = a_1$, $b_2 = c_1$.

Если $f'(c_1) < 0$, то принимаем $a_2 = c_1$, $b_2 = b_1$.

Если $f'(c_1) = 0$, то задача решена и точка c_1 – искомая.

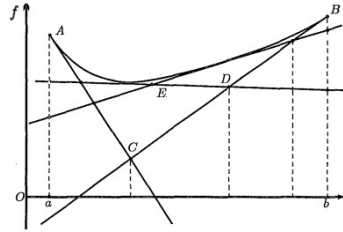


Рисунок 2.4: Геометрическая иллюстрация метода касательных.

Повторяем процедуру до тех пор пока не выполнится критерий остановки, в качестве которого тут можно взять, например,

$$|b_k - a_k| \leq \varepsilon \tag{2.1}$$

или

$$|f'(c_k)| \leq \varepsilon, \tag{2.2}$$

или

$$|f(b_k) - f(a_k)| \leq \varepsilon, \tag{2.3}$$

либо их комбинацию. Здесь ε – некоторое положительное число.

На рис. 2.4 показано три итерации метода касательных. Ясно, что реализация этого метода основывается, по сути, на приближении графика нашей функции кусочно-линейной аппроксимацией.

Задания

1. Подумайте над различиями критериев остановки 2.1 и 2.2. Приведите примеры графиков функций, для которых 2.1 выполняется раньше 2.2 и наоборот.
2. Зная a_k , b_k , $f(x)$ получите выражение для c_k .

Метод Ньютона-Рафсона. Нашей целью является поиск решения уравнения $f'(x) = 0$. Можно решать эту задачу

так: задаем x_0 , проводим в этой точке касательную к функции $f'(x)$, находим точку пересечения этой касательной с осью Ox . Обозначаем эту т. x_1 . Продолжаем процедуру до тех пор пока не выполнится критерий остановки $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$, для некоторого положительного ε .

Очевидно ордината точек касательной описывается уравнением

$$f'(x_k) + f''(x_k)(x - x_k),$$

поэтому приравняв это выражение к нулю, найдем x_{k+1}

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}.$$

Рассматриваемый алгоритм является методом второго порядка.

Пример. Рассмотрим функцию

$$f(x) = x + \frac{2}{x},$$

выберем $x_0 = 0.5$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.5$.

Имеем

$$f'(x) = 1 - \frac{2}{x^2}, \quad f''(x) = \frac{4}{x^3}.$$

1. $f'(x_0) = -7$, $|f'(x_0)| > \varepsilon$, поэтому продолжаем вычисления
 $f''(x_0) = 32$, $x_1 = 0.5 - \frac{-7}{32} = 0.719$,
2. $f'(x_1) = -2.869$, $|f'(x_1)| > \varepsilon$, продолжаем вычисления
 $f''(x_1) = 10.762$, $x_2 = 0.719 - \frac{-2.869}{10.762} = 0.986$,
3. $f'(x_2) = -1.057$, $|f'(x_2)| > \varepsilon$, продолжаем вычисления
 $f''(x_2) = 4.173$, $x_3 = 0.986 - \frac{-1.057}{4.173} = 1.239$,

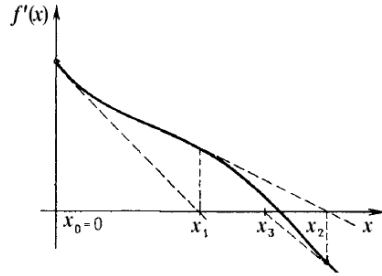


Рисунок 2.5: Геометрическая иллюстрация метода Ньютона-Рафсона.

4. $f'(x_3) = -0.303$, $|f'(x_3)| < \varepsilon$, поэтому вычисления заканчиваем и принимаем

$$x_m = x_3 = 1.239.$$

Задания

1. Метод Ньютона-Рафсона чувствителен к выбору начальной точки. Приведите пример, когда из-за неудачно выбранной начальной точки метод расходится.

Метод секущих. Если в методе Ньютона-Рафсона вместо второй производной воспользоваться ее приближением

$$f''(x_k) \approx \frac{f'(x_k) - f'(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}},$$

то получим метод секущих, или, как его еще называют, метод хорд, являющийся методом первого порядка

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f'(x_k) - f'(x_{k-1})} f'(x_k).$$

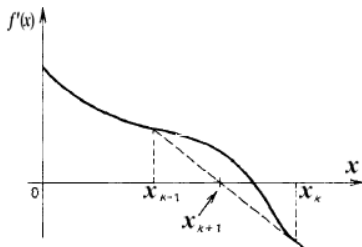


Рисунок 2.6: Геометрическая иллюстрация метода секущих.

Как видим, выражение описывает точку пересечения прямой, проходящей через точки $(x_k, f'(x_k))$ и $(x_{k-1}, f'(x_{k-1}))$ с осью Ox .

Задания

1. Показать справедливость последнего утверждения.

В заключении главы отметим, что чем больше информации об исследуемой функции в процессе минимизации используется, тем быстрее достигается результат. Таким образом, скорость сходимости процесса минимизации увеличивается, но попутно возрастает количество необходимых вычислений. Так, из рассмотренных методов, медленнее всего сходятся методы нулевого порядка, далее идут методы первого, а затем второго порядка. Однако, например,

в методе касательных, в отличие от метода золотого сечения, приходится вычислять не только значение рассматриваемой функции, но и ее производную, а в методе Ньютона-Рафсона еще и вторую производную.

ГЛАВА 3. МНОГОМЕРНАЯ МИНИМИЗАЦИЯ

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

§ 3.1. Метод покоординатного спуска

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

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

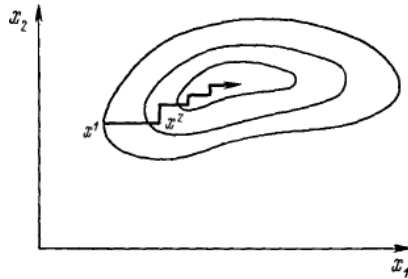


Рисунок 3.1: Иллюстрация метода покоординатного спуска.

Итак, после n 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 $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| \leq \varepsilon$ или $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon$, либо их комбинация.

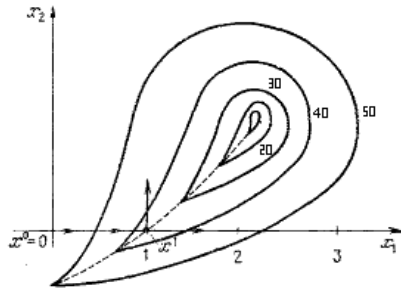


Рисунок 3.2: Метод «застревает» в точке, отличной от оптимума.

Отметим, что на каждом шаге цикла приходится решать задачу одномерной минимизации, которой была посвящена первая глава.

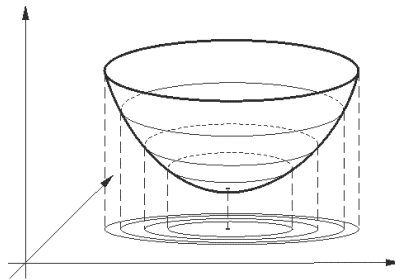


Рисунок 3.3: Линии уровня.

Иллюстрируют работу методов многомерной оптимизации обычно с помощью линий уровня – геометрического места точек пространства аргументов, для которых значения исследуемой функции одинаковы (см. рис. 3.3). Для функций двух переменных линии уровня изображаются на плоскости, что позволяет наглядно продемонстрировать работу алгоритма. Так на рис. 3.1 видно, что в методе покоординатного спуска минимизация ведется поочередно по направлениям параллельным осям координат (по ортам). На рис. 3.2 показан случай, когда метод останавливается («застрева-

ет") в точке x_1 , не являющийся оптимумом – любое движение из нее вдоль ортов приводит лишь к увеличению значения функции.

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)^T$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.5$, взяв в качестве критерия останковки условие $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon$

1. (a) Фиксируем $x_2 = x_2^0 = 1$ и проводим минимизацию по переменной x_1 . Таким образом, нужно минимизировать функцию $f(1 + \alpha, 1) = 9(1 + \alpha)^2 + 1$ по скалярному аргументу α , то есть найти оптимальный в смысле минимизации функции шаг из т. x^0 вдоль орта $(1, 0)^T$. Очевидно $\alpha = -1$, поэтому $x_1^1 = 0$.
- (b) Фиксируем $x_1 = x_1^1 = 0$ и проводим минимизацию по переменной x_2 . То есть нужно минимизировать функцию $f(0, 1 + \alpha) = (1 + \alpha)^2$ по α . Очевидно $\alpha = -1$, поэтому $x_2^1 = 0$.

Окончательно после первого цикла получаем $x^1 = (0, 0)^T$, но $\|x^1 - x^0\| = \sqrt{2} \geq 0.5$, поэтому вычисления продолжаем.

2. (a) Аналогично предыдущему получаем $x_1^2 = 0$,
- (b) $x_2^2 = 0$.

Итак, имеем $x^2 = (0, 0)^T$, но $\|x^2 - x^1\| = 0 < 0.5$, поэтому вычисления останавливаем и принимаем $x_{min} = (0, 0)^T$.

§ 3.2. Градиентные методы

Вначале рассмотрим идейную основу.

Выпишем разложение функции f в окрестности точки x_k в ряд Тейлора:

$$f(x) = f(x^k) + \langle f'(x^k), x - x^k \rangle + o(x - x^k), \quad (3.1)$$

где $f'(x^k)$ – градиент функции f в точке x^k , а

$$\lim_{x \rightarrow x^k} \frac{o(x - x^k)}{\|x - x^k\|} = 0.$$

Ясно, что при достаточно малом $\|x - x^k\|$ значение разности $f(x) - f(x^k)$ определяется главной частью приращения $\langle f'(x^k), x - x^k \rangle$. С другой стороны, скалярное произведение двух векторов принимает наименьшее значение тогда, когда векторы разнонаправлены. Поэтому при $x - x^k = -\alpha f'(x^k)$, где $\alpha > 0$ — достаточно малое положительное число, получим

$$f(x) - f(x^k) \approx \langle f'(x^k), x - x^k \rangle = \langle f'(x^k), -\alpha f'(x^k) \rangle = -\alpha \|f'(x^k)\|^2 < 0.$$

Поэтому приняв $x^{k+1} = x^k - \alpha f'(x^k)$, при том же самом α , получим $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ и сможем таким образом построить последовательность $\{x^k\}$, на которой значения нашей функции будут убывать. Число α представляет собой длину шага, который необходимо сделать в направлении антиградиента.

Существует несколько вариантов этого метода, отличающиеся способом выбора длины шага.

Градиентный метод с дроблением шага. Этот метод предложен и подробно рассматривается в [2]. Вначале выбирают некоторое $\tilde{\alpha} > 0$ и произвольное число $\varepsilon \in (0, 1)$. Эти значения одни и те же для всех итераций ($k = 1, 2, \dots$). Далее принимают $\alpha = \tilde{\alpha}$ и

1. определяют точку $x = x^k - \alpha f'(x^k)$;
2. вычисляют $f(x) = f(x^k - \alpha f'(x^k))$;
3. проверяют выполнение неравенства

$$f(x) - f(x^k) \leq -\alpha \varepsilon \|f'(x^k)\|^2;$$

4. если это неравенство выполняется, то принимают $\alpha_k = \alpha$, если же неравенство не выполняется, производим деление α путем умножения на произвольное положительное $\lambda < 1$ и переходим к шагу 1;
5. получают $x^{k+1} = x^k - \alpha_k f'(x^k)$, проверяют критерий остановки (например $\|f'(x^{k+1})\| < \delta$, для некоторого малого $\delta > 0$) и переходят к следующей итерации.

Как видим, значение функции на каждом шаге меньше, чем на предыдущем. Однако при приближении к точке экстремума, норма градиента становится мала и, соответственно (см. неравенство из третьего пункта алгоритма), значение функции уменьшается на малую величину.

Таким образом, на последовательности $\{x^k\}$ функция убывает, но это убывание становится все медленнее по мере приближения к точке экстремума.

У читателя может возникнуть вопрос о том, какие условия гарантируют выполнение проверяемого неравенства при малых α . Ответ на этот вопрос получим в ходе доказательства следующей теоремы.

Теорема 3.1. *Если гладкая функция $f(x)$ ограничена снизу, ее градиент $f'(x)$ удовлетворяет условию Липшица:*

$$\|f'(x) - f'(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n,$$

а выбор значения α_k производится по описанному выше алгоритму, то $\|f'(x^k)\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$, какова бы ни была начальная точка x^0 .

Доказательство. По теореме о среднем имеем

$$f(x) - f(x^k) = \langle f'(x^{kc}), x - x^k \rangle,$$

где $x^{kc} = x^k + \theta(x - x^k)$, $\theta \in [0, 1]$. Далее

$$\begin{aligned} f(x) - f(x^k) &= \langle f'(x^{kc}) - f'(x^k), x - x^k \rangle + \langle f'(x^k), x - x^k \rangle \leq \\ &\leq L\|x^{kc} - x^k\|\|x - x^k\| - \alpha\|f'(x^k)\|^2 \leq \alpha\|f'(x^k)\|^2(\alpha L - 1). \end{aligned}$$

Если выбирать такие малые α , чтобы

$$\alpha\|f'(x^k)\|^2(\alpha L - 1) \leq -\varepsilon\alpha\|f'(x^k)\|^2,$$

то есть

$$\alpha \leq \hat{\alpha} = \frac{1 - \varepsilon}{L},$$

то выполнится и проверяемое в алгоритме неравенство. Тем самым показано, что требуемое неравенство действительно выполнится при достаточно малых α .

Итак, выбирая α_k в соответствии с приведенным выше алгоритмом, для всех $k = 1, 2, \dots$ (при $\|f'(x^k)\| \neq 0$) получим

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\varepsilon\alpha\|f'(x^k)\|^2 < 0.$$

Таким образом, последовательность $\{f(x^k)\}$ строго монотонно убывает и ограничена снизу, поэтому она сходится, а, следовательно, является фундаментальной. Отсюда $f(x^{k+1}) - f(x^k) \rightarrow 0$, при $k \rightarrow \infty$. Так как при любых α меньших $\hat{\alpha}$ проверяемое неравенство гарантированно выполнится, можно утверждать, что при реализации алгоритма будем получать α по крайней мере не меньше $\hat{\alpha}$, то есть $\alpha \geq \hat{\alpha}$, откуда

$$\|f'(x^k)\| \leq \frac{f(x^k) - f(x^{k+1})}{\varepsilon\alpha} \leq \frac{f(x^k) - f(x^{k+1})}{\varepsilon\hat{\alpha}}.$$

Числа ε , $\hat{\alpha}$ не зависят от k , поэтому $\|f'(x^k)\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Градиентный метод с постоянным шагом. Из доказательства теоремы 3.1 видно, что если при всех k положить $\alpha_k = \bar{\alpha}$, где $\bar{\alpha}$ – некоторое фиксированное число, для которого

$$0 < \bar{\alpha} \leq \frac{1 - \varepsilon}{L},$$

то соответствующая последовательность $\{x_k\}$ будет сходиться к стационарной точке. Таким образом, приходим к варианту градиентного метода с постоянным шагом. Для его реализации выбирают некоторое положительное число $\bar{\alpha}$ (на практике обычно не превосходящее 0.01), а затем с помощью известного x^k , строят

$$x^{k+1} = x^k - \bar{\alpha}f'(x^k),$$

не забывая, опять же, на каждой итерации проверять критерий остановки.

Градиентный спуск с заранее заданным шагом. Здесь предлагается выбрать в качестве α_k соответствующие значения из последовательности $\{\lambda_k\}$, для которой

$$\begin{cases} \lambda_k > 0, \lambda_k \rightarrow 0 \text{ при } k \rightarrow \infty, \\ \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \infty. \end{cases}$$

Так, можно положить $\alpha_k = \frac{1}{k}$, и тогда

$$x^{k+1} = x^k - \frac{1}{k} f'(x^k).$$

Этот метод называют так же методом расходящегося ряда.

Метод наискорейшего градиентного спуска (МНГС).

Можно искать оптимальную длину шага, то есть α_k , доставляющее минимум функции в направлении антиградиента:

$$f(x^k - \alpha_k f'(x^k)) = \min_{\alpha \geq 0} f(x^k - \alpha f'(x^k)).$$

Заметим, что по необходимому условию экстремума оптимальное α должно удовлетворять

$$\frac{d}{d\alpha} f(x^k - \alpha f'(x^k)) = 0,$$

то есть

$$\langle -f'(x^k), f'(x^k - \alpha f'(x^k)) \rangle = 0.$$

Определив отсюда α_k , получим:

$$\langle -f'(x^k), f'(x^{k+1}) \rangle = 0,$$

то есть направления, вдоль которых ведется минимизация в методе наискорейшего градиентного спуска на соседних шагах ортогональны.

Если рассматриваемая функция выпукла, то ее линии уровня схематически можно изобразить так, как это сделано на рис. 3.4. Ясно, что «большой» линии уровня соответствует большее значение функции. Поэтому делая из точки x^k оптимальный шаг вдоль полупрямой, определяемой антиградиентом, попадаем в точку касания этой полупрямой с некоторой линией уровня. Действительно, через любую другую точку этой полупрямой проходит «большая» линия уровня, а, значит, и значение функции в любой другой точке больше.

Градиент функции в точке ортогонален ее линии уровня, проходящей через ту же точку. Отсюда опять приходим к уже известному факту: направления, вдоль которых ведется минимизация в методе наискорейшего градиентного спуска на соседних шагах, ортогональны.

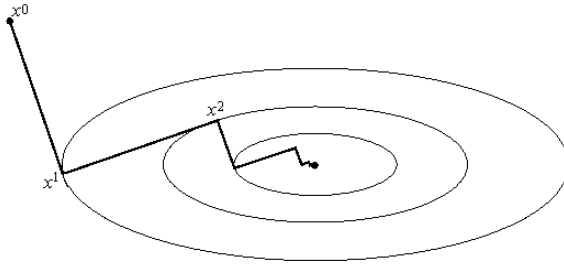


Рисунок 3.4: Метод наискорейшего градиентного спуска.

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.05$, взяв в качестве критерия останковки условие $\|f'(x^k)\| \leq \varepsilon$. Будем вести расчеты с точностью до третьего знака после запятой. Имеем $f'(x_1, x_2) = (18x_1, 2x_2)^T$, поэтому

$$1. \quad x = x^0 - \alpha f'(x^0) = (1, 1)^T - \alpha(18, 2)^T, \text{ откуда}$$

$$f(x^0 - \alpha f'(x^0)) = 9(1 - 18\alpha)^2 + (1 - 2\alpha)^2.$$

Поэтому

$$\alpha_0 = \arg \min_{\alpha > 0} f(x^0 - \alpha f'(x^0)) = 0.056,$$

$$x^1 = x^0 - \alpha_0 f'(x^0) = (-0.008, 0.888)^T.$$

$$2. \quad f'(x^1) = (-0.144, 1.776)^T. \text{ Критерий останковки не выполнен}$$

$$\|f'(x^1)\| = \sqrt{\left(\frac{\partial f(x^1)}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial f(x^1)}{\partial x_2}\right)^2} = 1.782 > \varepsilon,$$

продолжаем вычисления. Действуя аналогично предыдущему, получим $\alpha_1 = 0.475$, $x^2 = (0.06, 0.044)^T$. Далее

$$3. \quad f'(x^2) = (1.08, 0.088)^T, \quad \|f'(x^2)\| = 1.084 > \varepsilon, \quad \alpha_2 = 0.056, \\ x^3 = (0.000, 0.039)^T.$$

4. $f'(x^3) = (0.000, 0.078)^T$, $\|f'(x^3)\| = 0.078 > \varepsilon$, $\alpha_3 = 0.5$,
 $x^4 = (0.000, 0.003)^T$.
5. $f'(x^4) = (0.000, 0.000)^T$, $\|f'(x^4)\| = 0 < \varepsilon$, поэтому принимаем
 в качестве точки минимума $x_{min} = x^4$.

В градиентных методах с постоянным и заранее заданным шагом расстояние, проходимое на каждой итерации вдоль антиградиента мало, поэтому они сходятся медленно. В методе же наискорейшего градиентного спуска с помощью решения задачи одномерной минимизации, находится оптимальная длина шага, что ведет к более быстрой сходимости.

Задания

1. Проанализируйте на примере, как влияет выбор чисел $\tilde{\alpha}$, ε , λ на сходимость градиентного метода с дроблением шага.
2. Исходя из разложения (3.1) ответьте, почему ε в градиентном методе с дроблением шага строго меньше единицы.
3. Показать, что градиент функции в некоторой точке ортогонален ее линии уровня, проходящей через ту же точку.

§ 3.3. Ускоренные градиентные методы

Возможны случаи, когда линии уровня исследуемой функции сильно вытянуты в одном направлении и сплюснены в другом. В этом случае говорят, что функция «овражного» типа. На этом классе функций обычные градиентные методы сходятся плохо. Например, на рис. 3.5 показана работа метода наискорейшего градиентного спуска при минимизации овражной функции. Видно, что быстро опустившись на дно оврага метод начинает медленное движение к точке минимума по «пилообразной» траектории. Для ускорения сходимости в подобных случаях используют специальные приемы, дающие возможность получить направление, проходящее вдоль «дна оврага». Это дает возможность сделать большой шаг по направлению к точке минимума и таким образом быстро приблизиться к ней.

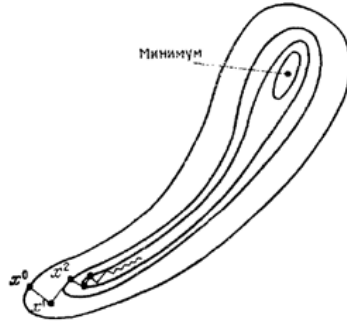


Рисунок 3.5: Медленная сходимость метода наискорейшего градиентного спуска.

Ускоренный градиентный метод p -го порядка. Пусть получена точка x^k . Предлагается [3] из этой точки сделать p шагов по методу наискорейшего градиентного спуска, дойдя до точки y^k . Далее для получения x^{k+1} проводится одномерная минимизация в направлении $y^k - x^k$ с началом в x^k . На практике рекомендуется брать $p = n$, где n – размерность пространства (x -ов).

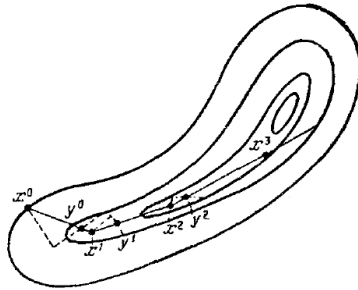


Рисунок 3.6: Ускоренный градиентный спуск второго порядка.

Отметим, что здесь для получения очередной точки последовательности $\{x^k\}$ приходится решать $n + 1$ задачу одномерной минимизации. То есть каждая итерация рассматриваемого метода более дорогостоящая, чем итерация по МНГС.

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.05$, взяв в качестве критерия остановки условие $\|f'(x^k)\| \leq \varepsilon$.

Сделав из $x^0 = (1, 1)^T$ два шага по методу наискорейшего градиентного спуска (см. пример 3.2), получим $y^0 = (0.06, 0.044)^T$. Совершаем одномерную минимизацию из точки x^0 вдоль направления $y^0 - x^0 = (-0.94, -0.956)^T$.

$$f(x^0 + \alpha(y^0 - x^0)) = 9(1 - 0.94\alpha)^2 + (1 - 0.956\alpha)^2 = \varphi(\alpha),$$

откуда

$$\operatorname{argmin}_{\alpha} \varphi(\alpha) = 1.062,$$

и, соответственно,

$$x^1 = (1 - 0.94 \cdot 1.062, 1 - 0.956 \cdot 1.062)^T = (0.002, -0.015)^T.$$

Так как $\|f'(x^1)\| = 0.047 \leq \varepsilon$, то принимаем

$$x_{min} = (0.002, -0.015)^T.$$

По сравнению с МНГС в ходе реализации данного алгоритма пришлось решить на одну задачу одномерной оптимизации меньше.

Овражный метод. Пусть получена точка x^k . В этом алго-

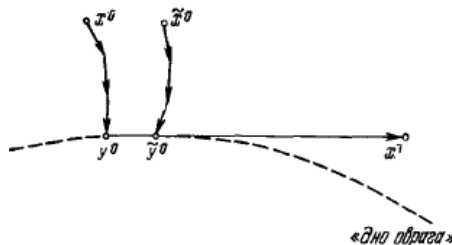


Рисунок 3.7: Овражный метод.

ритме [4] берется точка \tilde{x}^k , близкая к x^k . Из этих точек делается

несколько шагов по методу градиентного спуска. В результате получаются точки y^k, \tilde{y}^k , определяющие прямую, проходящую почти вдоль «дна оврага». Далее для получения x^{k+1} проводится одномерная минимизация в направлении $\tilde{y}^k - y^k$ с началом в y^k .

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)^T$ и найдем точку минимума с погрешностью $\varepsilon = 0.05$, взяв в качестве критерия останова условие $\|f'(x^k)\| \leq \varepsilon$.

Выберем $\tilde{x}^0 = (1.1, 1.1)^T$. Сделав из x^0 (см. пример 3.2) и \tilde{x}^0 по одному шагу по методу наискорейшего градиентного спуска, получим $y^0 = (-0.008, 0.888)^T$, $\tilde{y}^0 = (-0.009, 0.977)^T$. Совершаем одномерную минимизацию из точки y^0 вдоль направления $\tilde{y}^0 - y^0 = (-0.001, 0.089)^T$.

$$f(y^0 + \alpha(\tilde{y}^0 - y^0)) = 9(-0.008 - 0.001\alpha)^2 + (0.888 + 0.089\alpha)^2 = \varphi(\alpha),$$

откуда

$$\operatorname{argmin}_{\alpha} \varphi(\alpha) = -9.975,$$

и, соответственно,

$$x^1 = (-0.008 + 0.001 \cdot 9.975, 0.888 - 0.089 \cdot 9.975)^T = (0.002, 0.000)^T.$$

Так как $\|f'(x^1)\| = 0.036 \leq \varepsilon$, то принимаем $x_{min} = (0.002, 0)^T$.

Таким образом, опять удалось сделать один большой шаг (равный по абсолютному значению 9.975) вдоль «дна оврага» и найти точку минимума с требуемой точностью, решив при этом три задачи одномерной оптимизации, против четырех в методе наискорейшего градиентного спуска.

§ 3.4. Метод сопряженных направлений

Рассмотрим выпуклую квадратичную функцию $q: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c,$$

где A – симметричная, положительно определенная матрица, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$ – некоторый вектор, c – константа. Линейно независимые направления $d_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 0, \dots, n-1$ называются

попарно сопряженными относительно квадратичной формы $q(x)$, если

$$d_i^T Ad_j = 0, \text{ при } i, j = 0, \dots, n-1, i \neq j.$$

Оказывается, если минимизировать $q(x)$ из начальной точки x^0 последовательно вдоль направлений d_i , то точка минимума будет найдена не более, чем за n шагов.

Итак, предположим, что точка $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$, где

$$\alpha_k = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}} q(x^k + \alpha d_k).$$

Из последнего условия получаем

$$\frac{d}{d\alpha} q(x^k + \alpha d_k) = d_k^T q'(x^{k+1}) = d_k^T (Ax^{k+1} + b) = 0,$$

откуда

$$d_k^T (Ax^k + b) + d_k^T Ad_k \alpha_k = 0,$$

$$\alpha_k = -\frac{d_k^T (Ax^k + b)}{d_k^T Ad_k} = -\frac{d_k^T \left(A \left(x^0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j d_j \right) + b \right)}{d_k^T Ad_k}.$$

Поэтому окончательно

$$\alpha_k = -\frac{d_k^T (Ax^0 + b)}{d_k^T Ad_k}.$$

Рассмотрим выражения $d_i^T (Ax^k + b)$ для $i = 0, \dots, k-1$. Можно аналогично предыдущему показать, что

$$\alpha_i = -\frac{d_i^T (Ax^0 + b)}{d_i^T Ad_i},$$

то есть

$$d_i^T (Ax^0 + b) = -d_i^T Ad_i \alpha_i.$$

Поэтому для любых $i = 0, \dots, k-1$ справедливо

$$d_i^T (Ax^k + b) = d_i^T \left(A \left(x^0 + \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j d_j \right) + b \right) = d_i^T (Ax^0 + b) + d_i^T Ad_i \alpha_i = 0,$$

то есть

$$d_i^T q'(x^k) = 0, \quad \forall i = 0, \dots, k-1. \quad (3.2)$$

Двигаясь из точки x^0 вдоль направлений d_i с шагами α_i , $i = 0, \dots, k-1$, мы все время остаемся в пределах аффинного многообразия, порожденного векторами d_i и проходящего через x^0 . Так как

$$x^k = x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d_i,$$

то x_k , очевидно, также принадлежит этому аффинному многообразию, которое по (3.2) ортогонально градиенту функции q в точке x^k . Но этот же градиент ортогонален поверхности уровня функции q , проходящей через ту же точку x^k . Поэтому указанное аффинное многообразие является касательным к поверхности уровня, проходящей через точку x_k , следовательно справедлива

Теорема 3.1. x^k – точка минимума функции $q(x)$ на аффинном многообразии, порожденном векторами d_0, \dots, d_{k-1} и проходящем через точку x^0 .

В частности, вследствие линейной независимости системы векторов $\{d_0, \dots, d_{n-1}\}$, $x^n = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j d_j$ – точка минимума функции $q(x)$ на всем пространстве \mathbb{R}^n .

Основной вопрос теперь состоит в том, как строить эти сопряженные направления. Будем искать их в виде

$$d_{k+1} = -q'(x^{k+1}) + \beta_k d_k, \quad d_0 = -q'(x^0),$$

где β_k – некая константа, $k < n$.

Тогда на первом шаге из того, что d_1 сопряжено с d_0 , получим $d_1^T A d_0 = 0$. Отсюда

$$\begin{aligned} (-q'(x^1) + \beta_0 d_0)^T A d_0 &= 0, \\ \beta_0 &= \frac{q'^T(x^1) A d_0}{d_0^T A d_0}. \end{aligned}$$

Покажем, что и в общем случае, если положить

$$\beta_k = \frac{q'^T(x^{k+1}) A d_k}{d_k^T A d_k}, \quad (3.3)$$

то d_0, \dots, d_{k+1} будут попарно сопряжены.

Доказательство будем вести по индукции. При $k = 0$ утверждение верно. Пусть оно верно при некотором $k - 1$, докажем его справедливость для k . Выражение (3.3) для β_k определяет $d_{k+1} = -q'(x^{k+1}) + \beta_k d_k$, сопряженное с d_k . Действительно,

$$d_{k+1}^T Ad_k = -q'^T(x^{k+1})Ad_k + \beta_k d_k^T Ad_k = 0.$$

Покажем теперь, что d_{k+1} попарно сопряжено с d_i , $i = 0, \dots, k - 1$. Для этого нужно показать, что $d_{k+1}^T Ad_i = 0$ при $i = 0, \dots, k - 1$. Очевидно

$$d_{k+1}^T Ad_i = (-q'(x^{k+1}) + \beta_k d_k)^T Ad_i = -q'^T(x^{k+1})Ad_i + \beta_k d_k^T Ad_i.$$

Второе слагаемое обращается в нуль по индуктивному предположению, поэтому

$$d_{k+1}^T Ad_i = -q'^T(x^{k+1})Ad_i.$$

Можем записать

$$Ad_i = A \frac{x^{i+1} - x^i}{\alpha_i} = \frac{1}{\alpha_i} ((Ax^{i+1} + b) - (Ax^i + b)),$$

то есть

$$Ad_i = \frac{1}{\alpha_i} (q'(x^{i+1}) - q'(x^i)).$$

Но

$$q'(x^{i+1}) = d_{i+1} + \beta_i d_i,$$

$$q'(x^i) = d_i + \beta_{i-1} d_{i-1}.$$

Таким образом, Ad_i — линейная комбинация векторов d_{i-1}, d_i, d_{i+1} (при $i = 0$ Ad_0 — линейная комбинация d_0, d_1). Направления d_0, \dots, d_k попарно сопряжены по индуктивному предположению. Тогда по теореме 3.1 вектор $q'(x^{k+1})$ ортогонален всем d_0, \dots, d_k . Поэтому при $i = 0, \dots, k - 1$

$$\begin{aligned} d_{k+1}^T Ad_i &= -q'^T(x^{k+1})Ad_i = \\ &= -\frac{1}{\alpha_i} q'^T(x^{k+1})(d_{i+1} + \beta_i d_i - d_i - \beta_{i-1} d_{i-1}) = 0. \end{aligned}$$

Линейная независимость построенных направлений следует из теоремы 3.1. Таким образом, наше утверждение доказано.

Перейдем теперь к упрощению формул для β_k . Для этого вначале заметим, что

$$\alpha_k = -\frac{d_k^T q'(x^k)}{d_k^T Ad_k} = -\frac{(-q'(x^k) + \beta_{k-1}d_{k-1})^T q'(x^k)}{d_k^T Ad_k} = \frac{q'^T(x^k)q'(x^k)}{d_k^T Ad_k}.$$

В выражении для β_k фигурирует Ad_k , которое можно записать в виде

$$Ad_k = \frac{A}{\alpha_k}(x^{k+1} - x^k) = \frac{1}{\alpha_k}(Ax^{k+1} - Ax^k).$$

Добавляя и вычитая вектор b получим

$$Ad_k = \frac{1}{\alpha_k}(q'(x^{k+1}) - q'(x^k)) = \frac{q'(x^{k+1}) - q'(x^k)}{q'(x^k)^T q'(x^k)} d_k^T Ad_k.$$

Откуда

$$\beta_k = \frac{q'^T(x^{k+1})Ad_k}{d_k^T Ad_k} = \frac{q'^T(x^{k+1})(q'(x^{k+1}) - q'(x^k))}{q'^T(x^k)q'(x^k)}. \quad (3.4)$$

Если вспомнить, что $q'(x^k) = -d_k + \beta_{k-1}d_{k-1}$, то с учетом ортогональности $q'(x^{k+1})$ векторам d_0, \dots, d_k можем переписать (3.4) в виде:

$$\beta_k = \frac{q'^T(x^{k+1})q'(x^{k+1})}{q'^T(x^k)q'(x^k)}. \quad (3.5)$$

Отметим, что в выражениях (3.4), (3.5) матрица A не фигурирует.

Описанный выше подход хорошо работает на выпуклых квадратичных функциях, позволяя минимизировать их за конечно число шагов. Ясно, что произвольная функция в некоторой окрестности минимума может быть аппроксимирована (с помощью разложения в ряд Тейлора) строго выпуклой квадратичной функцией

(если выполнены достаточные условия минимума второго порядка). Поэтому можно рассчитывать, что применение аналогичного алгоритма к произвольным достаточно гладким функциям тоже даст хорошие результаты. Итак, пусть задана некоторая гладкая функция $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Выражения (3.4), (3.5) приводят к двум методам:

Метод Флетчера-Ривза.

Выбираем x^0 , $d_0 = -f'(x^0)$.

1. Пусть имеется x^k , d_k .

Если $k + 1$ кратно n , вычисляем $\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha} f(x^k + \alpha d_k)$ и строим

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k,$$

$$d_{k+1} = -f'(x^{k+1}).$$

Иначе переходим ко второму пункту.

2. Вычисляем $\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha} f(x^k + \alpha d_k)$.

Строим

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k,$$

$$\beta_k = \frac{\|f'(x^{k+1})\|^2}{\|f'(x^k)\|^2},$$

$$d_{k+1} = -f'(x^{k+1}) + \beta_k d_k.$$

3. Проверяем критерий остановки. Если он выполнен, то заканчиваем вычисления. Если нет, то увеличиваем k на единицу и переходим к первому пункту.

Метод Полака-Рибьера.

Отличается от метода Флетчера-Ривза формулой для нахождения β_k во втором пункте. Здесь предлагается использовать выражение:

$$\beta_k = \frac{f'^T(x^{k+1})(f'(x^{k+1}) - f'(x^k))}{\|f'(x^k)\|^2}.$$

Первый пункт в этих методах обязывает нас на шагах кратных n начинать построение сопряженных направлений заново (обновление метода). При этом условии шаги с номерами $nl + 1$, где

$l = 0, 1, \dots$ совпадают с шагом по МНГС, на промежуточных же шагах, очевидно, значения функции не возрастают. Отсюда сходимость построенных методов будет следовать непосредственно из сходимости МНГС. Если методы периодически не обновлять, то накопление погрешностей в процессе расчетов может приводить к тому, что вектора d_j при больших j перестают указывать направления убывания функции f . Более детальное описание указанных методов, читатель может найти в [3].

Ясно, что для квадратичной функции методы Флетчера-Ривза и Полака-Рибьера эквивалентны. Первый шаг по этим методам совпадает с шагом наискорейшего градиентного спуска.

Отметим, что хотя изначально (при определении сопряженных направлений d_i , $i = 0, \dots, n - 1$) и использовалась матрица вторых производных (A), однако в формулы расчета полученных алгоритмов она не входит. Таким образом, эти методы остаются методами первого порядка.

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)^T$ и найдем точку минимума с помощью метода Флетчера-Ривза. Понятно, что тут он должен привести нас к точке минимума за два шага. Здесь, в отличие от примера 3.2, будем вести расчеты с точностью до пяти знаков после запятой, так как сходимость метода существенно зависит от точности решения задачи одномерной минимизации.

Сделав из x^0 один шаг по методу наискорейшего градиентного спуска, получим $d_0 = (-18, -2)^T$, $\alpha_0 = 0.05616$, $x^1 = (-0.01088, 0.88768)^T$, $f'(x^1) = (-0.19584, 1.77536)^T$,

$$\beta_0 = \frac{\|f'(x^1)\|^2}{\|f'(x^0)\|^2} = 0.00973,$$

$$d_1 = -f'(x^1) + \beta_0 d_0 = (0.0207, -1.79482)^T.$$

Переходим к следующему шагу. $x^2 = x^1 + \alpha_1 d_1$, где $\alpha_1 = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}} f(x^1 + \alpha d_1)$. В результате, получаем $\alpha_1 = 0.49479$, $x^2 = (-0.00064, -0.00038)^T$, что очень близко к настоящей точке минимума $(0, 0)^T$. Чтобы получить более точный результат, нужно вести расчеты с большей точностью.

Перейдем теперь, к методам второго порядка, то есть использующим матрицу Гессе – матрицу вторых производных. Ясно, что ввиду использования большего количества информации, эти методы должны сходиться быстрее методов первого порядка.

§ 3.5. Метод Ньютона

Пусть функция f дважды непрерывно дифференцируема и матрица Гессе $f''(x)$ – положительно определена для любых $x \in \mathbb{R}^n$. Здесь, как и прежде, будем искать точку x^* , в которой выполнено необходимое условие минимума $f'(x^*) = 0$. Итак, пусть имеется некоторая точка x^k . Рассмотрим разложение градиента в ряд Тейлора в окрестности этой точки:

$$f'(x) = f'(x^k) + \langle f''(x^k), x - x^k \rangle + o(\|x - x^k\|),$$

где

$$\lim_{x \rightarrow x^k} \frac{o(\|x - x^k\|)}{\|x - x^k\|} = 0.$$

Идея метода Ньютона заключается в замене функции $f'(x)$ в окрестности точки x^k ее аппроксимацией $f'(x^k) + \langle f''(x^k), x - x^k \rangle$.

Точку, в которой эта аппроксимация равна нулю, берут в качестве x^{k+1} :

$$x^{k+1} = x^k - [f''(x^k)]^{-1} f'(x^k). \quad (3.6)$$

Итак, задавая произвольную x^0 , запускают расчеты по формуле (3.6), проверяя на каждой итерации критерий остановки. Этот процесс является, очевидно, обобщением на случай функции многих переменных метода Ньютона-Рафсона, который, как мы видели, может расходиться, когда начальная точка далека от x^* . Для того чтобы преодолеть эту проблему, алгоритм (3.6) модифицируют. Прежде, чем перейти к описанию этой модификации, отметим, что в силу положительной определенности $f''(x)$ направление $p_k = -[f''(x^k)]^{-1} f'(x^k)$ будет направлением спуска в точке x^k , так как

$$\langle f'(x^k), p_k \rangle = \langle f'(x^k), -[f''(x^k)]^{-1} f'(x^k) \rangle < 0. \quad (3.7)$$

Таким образом, классический метод Ньютона можно рассматривать как процесс:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p_k,$$

где $\alpha_k = 1$. В модифицированном же методе Ньютона предлагается искать α_k с помощью решения задачи одномерной минимизации:

$$\alpha_k = \operatorname{argmin}_{\alpha > 0} f(x^k - \alpha [f''(x^k)]^{-1} f'(x^k)).$$

Пример. Рассмотрим функцию $f(x) = 9x_1^2 + x_2^2$, выберем $x^0 = (1, 1)^T$ и найдем точку минимума с помощью модифицированного метода Ньютона.

Имеем

$$f'(x) = \begin{pmatrix} 18x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}; \quad f''(x) = \begin{pmatrix} 18 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}; \quad [f''(x)]^{-1} = \begin{pmatrix} 1/18 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 1/18 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 18 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \alpha \\ 1 - \alpha \end{pmatrix},$$

$$\alpha_0 = \operatorname{argmin}_{\alpha > 0} (9(1 - \alpha)^2 + (1 - \alpha)^2) = 1.$$

Поэтому окончательно

$$x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Задания

1. Почему при применении к строго выпуклой квадратичной функции метод Ньютона сходится за одну итерацию.
2. Почему для строго выпуклой квадратичной функции в модифицированном методе Ньютона всегда $\alpha_0 = 1$.
3. Покажите, что матрица, обратная к положительно определенной, так же является положительно определенной (этот факт использовался в (3.7)).

§ 3.6. Квазиньютоновский метод с поправкой ранга 1

Основной трудностью при реализации метода Ньютона является вычисление и обращение матрицы вторых производных. Пусть необходимо минимизировать функцию методом Ньютона квадратичную функцию

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c,$$

где A – симметричная, положительно определенная матрица, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$ – некоторый вектор, c – константа. Если каким-то образом удастся заменить в (3.6) матрицу $[q'']^{-1} = A^{-1}$ на некоторую ее аппроксимацию H_k так, чтобы последовательность H_k за конечное число шагов сходилась к A^{-1} , то последний шаг этого метода совпадет с шагом по методу Ньютона, который для квадратичной функции сходится за одну итерацию. То есть такой алгоритм позволит минимизировать $q(x)$ за конечное число шагов. Ясно, что применение его к произвольной функции так же должно давать хорошие результаты, по крайней мере в окрестности точки минимума (вспомните рассуждения из параграфа 3.4).

Итак, пусть имеется x^k , H^k . Будем считать

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k H_k f'(x^k), \quad \alpha_k = \underset{\alpha > 0}{\operatorname{argmin}} f(x^k - \alpha H_k f'(x^k)).$$

Имеем

$$f'(x^{k+1}) - f'(x^k) = f''(x^k)(x^{k+1} - x^k) + o(x - x^k).$$

Отсюда, отбрасывая $o(x - x^k)$, можем записать приближенное равенство

$$[f''(x^k)]^{-1}(f'(x^{k+1}) - f'(x^k)) \approx x^{k+1} - x^k,$$

которое для квадратичной функции с отличным от нуля гессианом, очевидно, превращается в точное равенство. Используя это приближенное равенство и информацию о полученной точке x^{k+1} , можно определить следующую матрицу H_{k+1}

$$H_{k+1}(f'(x^{k+1}) - f'(x^k)) = x^{k+1} - x^k. \quad (3.8)$$

Условие (3.8) называют квазиньютоновским. Обозначим

$$\gamma_k = f'(x^{k+1}) - f'(x^k), \quad \delta_k = x^{k+1} - x^k.$$

Тогда (3.8) переписывается в виде

$$H_{k+1}\gamma_k = \delta_k.$$

Будем искать H_{k+1} в виде

$$H_{k+1} = H_k + U_k,$$

где матрица U_k – матрица поправок. В зависимости от ее ранга говорят о квазиньютоновских методах с поправками различных рангов (обычно 1 или 2). Будем рассматривать лишь случай поправки единичного ранга, поэтому примем $U_k = uv^T$, где u и v – n -мерные вектора-столбцы. Тогда из (3.8) получим

$$(H_k + uv^T)\gamma_k = \delta_k,$$

откуда

$$u = \frac{1}{v^T\gamma_k}(\delta_k - H_k\gamma_k). \quad (3.9)$$

Матрица вторых производных симметрична, поэтому будем считать, что и H_k симметрична, и добиваться симметричности матрицы H_{k+1} . Для этого нужно, чтобы вектора u и v были коллинеарны, то есть, чтобы $v^T = \lambda u^T$, где $\lambda \in \mathbb{R}$.

$$H_{k+1} - H_k = uv^T = \frac{(\delta_k - H_k\gamma_k)v^T}{v^T\gamma_k} = \frac{(\delta_k - H_k\gamma_k)\lambda u^T}{\lambda u^T\gamma_k},$$

используя представление (3.9) для u , выразим

$$H_{k+1} - H_k = \frac{(\delta_k - H_k\gamma_k)(\delta_k - H_k\gamma_k)^T}{(\delta_k - H_k\gamma_k)^T\gamma_k}.$$

В [3] доказана следующая

Теорема 3.1. Пусть f квадратичная функция, A — ее матрица Гессе (предполагаемая положительно определенной). Пусть итерационный процесс с началом в точке x^0 при перемещении вдоль n последовательно независимых направлений $\delta_1, \dots, \delta_n$ порождает последовательно точки $x^1 = x^0 + \delta_1, \dots, x^n = x^{n-1} + \delta_n$. Тогда последовательность матриц H_k :

H_0 — произвольная симметричная матрица,

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\delta_k - H_k \gamma_k)(\delta_k - H_k \gamma_k)^T}{(\delta_k - H_k \gamma_k)^T \gamma_k},$$

сходится не более чем за n этапов к обращению A^{-1} матрицы Гессе функции f , причем

$$\gamma_k = f'(x^{k+1}) - f'(x^k) = A(x^{k+1} - x^k) = A\delta_k.$$

Итак, окончательно сформулируем алгоритм:

Выбираем произвольную точку x^0 , $H_0 = E$ (E — единичная матрица).

1. Пусть заданы x^k , H^k . Вычисляем

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k H_k f'(x^k),$$

где $\alpha_k = \underset{\alpha > 0}{\operatorname{argmin}} f(x^k - \alpha H_k f'(x^k))$.

2. Проверяем критерий остановки: если выполнен, то расчеты заканчиваются и $x^* = x^{k+1}$, если нет, то переходим к пункту 3.

3. Если $k + 1$ кратно n , то $H_{k+1} = E$, иначе

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\delta_k - H_k \gamma_k)(\delta_k - H_k \gamma_k)^T}{(\delta_k - H_k \gamma_k)^T \gamma_k}$$

увеличиваем k на единицу и переходим к пункту 1.

При этом условия шаги с номерами $nl + 1$, где $l = 0, 1, \dots$ совпадают с шагом по МНГС, на промежуточных же шагах, очевидно, значения функции не возрастают. Отсюда сходимость описанного метода будет следовать непосредственно из сходимости МНГС.

Более подробно с классом квазиньютоновских методов читатель может ознакомиться, например, в [5].

§ 3.7. Численный эксперимент

В заключении второй главы применим изученные методы для минимизации функции Розенброка

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + 5(1 - x_1)^2.$$

Очевидно минимальное значение этой функции равно нулю и достигается в точке $(1, 1)^T$. Возьмем $x^0 = (0, 0)^T$, $\varepsilon = 0.003$, останавливать вычисления будем тогда, когда норма градиента станет меньше ε . В результате получим

Название метода	время, с	ит-ий	x^*	$f(x^*)$
ГС с дроб-ем шага	0.57	731	$\begin{pmatrix} 0.9905 \\ 0.9806 \end{pmatrix}$	4.77e-04
МНГС	23.14	296	$\begin{pmatrix} 0.9994 \\ 0.9987 \end{pmatrix}$	2.02e-06
Ускор. спуск 2-порядка	85.47	138	$\begin{pmatrix} 0.9994 \\ 0.9988 \end{pmatrix}$	1.76e-06
Метод Флетчера-Ривза	1.79	11	$\begin{pmatrix} 0.9999 \\ 0.9998 \end{pmatrix}$	5.9e-08
Метод Ньютона	1.83	9	$\begin{pmatrix} 0.9999 \\ 0.9999 \end{pmatrix}$	2.4e-08

Везде, где необходима одномерная минимизация, она проводилась с помощью метода пассивного поиска с точностью 0.00001. В градиентном методе с дроблением шага, дробление шага проводилось с помощью $\delta = 0.9$. Как видим, этот метод привел к решению быстрее всего. Дело в том, что при его реализации, в отличие от других методов, не производилась одномерная оптимизация. Время расчетов по остальным методам можно значительно сократить, если использовать более совершенные алгоритмы для одномерной минимизации.

Ускоренному градиентному спуску второго порядка понадобилось меньше итераций, чем МНГС, но он работал дольше последнего.

В методе Флетчера-Ривза «обнуление» проводилось на номерах итераций, кратных трем. Этот метод сошелся быстрее метода Ньютона, но потребовал больше итераций.

Наглядно демонстрируют работу использованных методов следующие иллюстрации* :

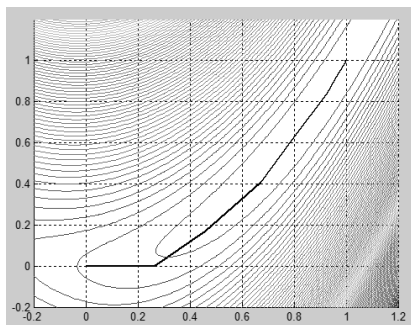
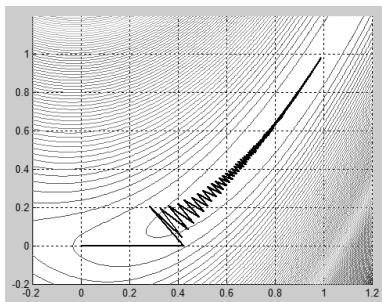
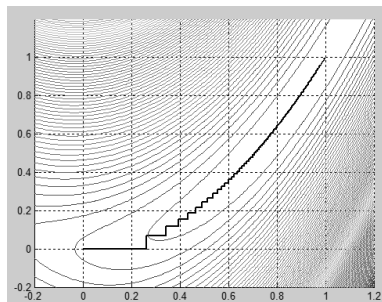


Рисунок 3.8: Линии уровня с траекториями движения к минимуму по методу Ньютона.

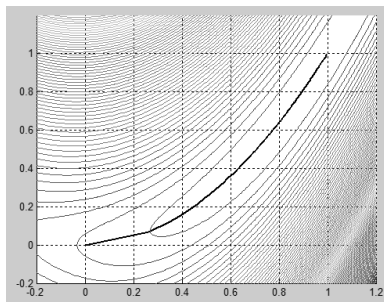


а)

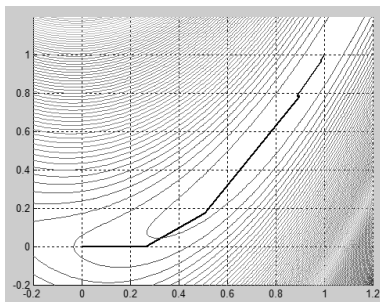


б)

*Расчеты и построения графиков выполнены в математическом пакете Matlab студентом Ивановым Н.Г.



б)



г)

Рисунок 3.9: Линии уровня с траекториями движения к минимуму соответствующие: а) Градиентному спуску с дроблением шага, б) Наискорейшему градиентному спуску, в) Ускоренному градиентному спуску второго порядка, г) Методу Флетчера-Ривза.

ГЛАВА 4. УСЛОВНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

В главе 3 рассматривалась задача безусловной оптимизации, то есть оптимизации функции на всем пространстве. Эта глава посвящена условной оптимизации, то есть решению задачи

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \inf, \\ x \in X \end{cases}$$

где X – некоторое непустое множество, называемое допустимым. Причем будем считать, что X определяется ограничениями в виде неравенств и равенств нулю некоторых достаточно гладких функций.

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \inf, \\ g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, l \end{cases} \quad (4.1)$$

Ясно, что тут допустимое множество

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0, h_j(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, l\}.$$

Если ограничения-неравенства в некоторой точке x обращаются в равенства, то соответствующие ограничения называют активными в данной точке, а совокупность всех таких индексов $R(x)$ – множеством индексов активных ограничений

$$R(x) = \{i \in \{1, \dots, m\} \mid g_i(x) = 0\}.$$

§ 4.1. Условия Куна-Таккера

Методы безусловной оптимизации базировались на необходимом условии экстремума (равенство градиента нулю), поэтому вначале сформулируем (см. [3], [6]) необходимые условия экстремума для задачи (4.1).

Теорема 4.1. [Куна – Таккера] Пусть $x^* \in X$ и градиенты $g'_i(x^*)$, $h'_j(x^*)$ при $i \in R(x^*)$, $j = 1, \dots, l$ образуют линейно независимую систему векторов, тогда для того, чтобы точка x^*

была решением задачи (4.1) необходимо, чтобы нашлись $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, \dots, m$ и μ_j , $j = 1, \dots, l$ произвольного знака, такие что

$$\begin{cases} f'(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g'_i(x^*) + \sum_{j=1}^l \mu_j h'_j(x^*) = 0, \\ \lambda_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{cases}$$

Аналогично можно сформулировать эти условия и для частных случаев задачи (4.1).

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min, \\ g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (4.2)$$

Тут допустимое множество

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m\}.$$

Теорема 4.2. [Куна — Таккера] Пусть $x^* \in X$ и градиенты $g'_i(x^*)$ при $i \in R(x^*)$ образуют линейно независимую систему векторов, тогда для того чтобы точка x^* была решением задачи (4.2) необходимо, чтобы нашлись $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, \dots, m$, такие что

$$\begin{cases} f'(x^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g'_i(x^*) = 0, \\ \lambda_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \end{cases}$$

Если же все ограничения имеют вид равенств, то приходим к известным из курса математического анализа условиям.

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min, \\ h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, l. \end{cases} \quad (4.3)$$

Тут допустимое множество

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, l\}.$$

Теорема 4.3. [Куна — Таккера] Пусть $x^* \in X$ и градиенты $h'_j(x^*)$ при $j = 1, \dots, l$ образуют линейно независимую систему

векторов, тогда для того чтобы точка x^* была решением задачи (4.3) необходимо, чтобы нашлись μ_j , $j = 1, \dots, l$, такие что

$$f'(x^*) + \sum_{j=1}^l \mu_j h'_j(x^*) = 0,$$

Пример. Рассмотрим простой пример

$$\begin{cases} f(x) = x^2 \longrightarrow \min, \\ g(x) = x - 1 \leq 0. \end{cases}$$

Ясно, что минимум здесь достигается в нуле. Попробуем получить эту точку с помощью условий Куна-Таккера. Выписывая эти условия, получаем

$$\begin{cases} 2x + \lambda = 0, \\ \lambda(x - 1) = 0, \\ \lambda \geq 0. \end{cases}$$

Здесь возможны два случая

$$\begin{cases} 2x + \lambda = 0, \\ \lambda = 0, \\ x - 1 \leq 0, \end{cases} \quad \text{либо} \quad \begin{cases} 2x + \lambda = 0, \\ x - 1 = 0, \\ \lambda \geq 0. \end{cases}$$

В первой из этих двух систем условие $x - 1 \leq 0$ необходимо, чтобы точка оставалась допустимой (принадлежала допустимому множеству X). Множество решений второй системы пусто. Из первой же получаем $x = 0$, $\lambda = 0$.

Пример. Рассмотрим

$$\begin{cases} f(x) = x_1^2 + x_2^2 \longrightarrow \min, \\ g(x) = 2x_1 + x_2 + 4 \leq 0. \end{cases}$$

Выписываем условия Куна-Таккера

$$\begin{cases} 2x_1 + 2\lambda = 0, \\ 2x_2 + \lambda = 0, \\ \lambda(2x_1 + x_2 + 4) = 0. \end{cases}$$

Здесь возможны два случая

$$\begin{cases} 2x_1 + 2\lambda = 0, \\ 2x_2 + \lambda = 0, \\ \lambda = 0, \\ 2x_1 + x_2 + 4 \leq 0, \end{cases} \quad \text{либо} \quad \begin{cases} 2x_1 + 2\lambda = 0, \\ 2x_2 + \lambda = 0, \\ \lambda \geq 0, \\ 2x_1 + x_2 + 4 = 0. \end{cases}$$

Множество решений первой системы пусто. Из второй же получаем

$$x_1 = -\frac{8}{5} = -1.6, \quad x_2 = -\frac{4}{5} = -0.8, \quad \lambda = \frac{8}{5} = 1.6.$$

Понятно, что при применении условий Куна-Таккера к задаче, содержащей k ограничений-неравенств, нужно рассмотреть 2^k систем.

§ 4.2. Метод внешних штрафов

Если взять функцию

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x \in X, \\ +\infty, & x \notin X, \end{cases}$$

то задачу условной оптимизации (4.1) можно заменить на задачу безусловной оптимизации функции $f(x) + H(x)$, так как

$$f(x) + H(x) = \begin{cases} f(x), & x \in X, \\ +\infty, & x \notin X, \end{cases}$$

поэтому минимум $f(x) + H(x)$ на всем пространстве совпадает с минимумом $f(x)$ на X . Проблемой на этом пути является отсутствие непрерывности у построенной таким образом функции $f(x) + H(x)$. Поэтому $H(x)$ аппроксимируют непрерывной функцией, которая принимает положительные значения при $x \notin X$ и равна нулю при $x \in X$. То есть x штрафуются за выход из допустимого множества. Методы, реализующие эту идею, называют методами внешних штрафов.

Рассмотрим

$$\varphi(x, r) = f(x) + rH(x),$$

где $r > 0$ — скаляр, называемый коэффициентом штрафа. С одной стороны, желательно, чтобы r было велико, потому что тогда точка минимума этой функции будет близка к решению (4.1). С другой стороны, при больших r задача минимизации функции $\varphi(x, r)$ становится плохо обусловленной, вследствие чего возможно появление вычислительных проблем при применении оптимизационных алгоритмов. Пример, иллюстрирующий этот эффект, приведен в [7]. Напомним, что задачу называют плохо обусловленной, если малые погрешности входных данных (а они неизбежны, так как любые расчеты ведутся с точностью до определенного знака после запятой) могут приводить к значительному изменению решения. Поэтому если начальная точка x^0 находится далеко от точки безусловного минимума $\varphi(x, r)$, то увеличивается вероятность прерывания работы алгоритма вследствие потери точности.

Для преодоления обозначенных трудностей на практике используют идею постепенного увеличения параметра штрафа. При этом на каждой итерации в качестве начальной берут точку, полученную на предыдущем шаге. Это позволяет каждый раз запускать алгоритм безусловной оптимизации из некоторой окрестности точки минимума. Итак, берут некоторую последовательность $\{r_k\}$, $r_k > 0$, $r_{k+1} > r_k$, $k \in \mathbb{N}$, полагают $x(r_0) = x^0$, выбирают некоторое $\varepsilon > 0$ и далее

- $x^0 = x(r_{k-1})$, $x(r_k) = \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^n} (f(x) + r_k H(x))$;
- если $H(x(r_k)) < \varepsilon$ (то есть $x(r_k)$ с точностью ε принадлежит допустимому множеству), то останавливаются и принимают $x^* = x(r_k)$. Если же это неравенство не выполняется увеличивают k на единицу и возвращаются к предыдущему пункту.

Таким образом, задача условной оптимизации сводится к последовательности задач безусловной оптимизации.

Можно показать (см., например [3]), что метод внешних штрафов сходится к оптимальному решению при достаточно слабых ограничениях.

Теорема. Пусть $H: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ — функция внешнего штрафа, удовлетворяющая условиям

$$\diamond H(x) \geq 0 \quad \forall x,$$

◇ $H(x) = 0 \Leftrightarrow x \in X$,

◇ H непрерывна.

Пусть f — непрерывная функция, множество X замкнуто и выполняется одно из двух условий:

1) $f(x) \rightarrow +\infty$ при $\|x\| \rightarrow +\infty$;

2) X ограничено и $H(x) \rightarrow +\infty$ при $\|x\| \rightarrow +\infty$.

Тогда при $r \rightarrow +\infty$:

а) последовательность $x(r)$ имеет по крайней мере одну предельную точку и всякая предельная точка этой последовательности есть (глобальное) оптимальное решение задачи;

б) $H(x(r)) \rightarrow 0$.

Укажем один из возможных видов функции $H(x)$, которым будем пользоваться в дальнейшем:

$$H(x) = \sum_{i=1}^m [\max(0, g_i(x))]^2 + \sum_{j=1}^l h_j(x)^2.$$

Эта функция непрерывно дифференцируема. Действительно, для каждого слагаемого из первой суммы можем записать

$$[\max(0, g_i(x))]^2 = \begin{cases} g_i^2(x), & \text{при } g_i(x) \geq 0, \\ 0, & \text{при } g_i(x) < 0, \end{cases}$$

откуда

$$\begin{aligned} ([\max(0, g_i(x))]^2)' &= \begin{cases} 2g_i'(x)g_i(x), & \text{при } g_i(x) \geq 0 \\ 0, & \text{при } g_i(x) < 0 \end{cases} = \\ &= 2g_i'(x) \begin{cases} g_i(x), & \text{при } g_i(x) \geq 0 \\ 0, & \text{при } g_i(x) < 0 \end{cases} = 2g_i'(x) \max(0, g_i(x)). \end{aligned}$$

Поэтому

$$H'(x) = \sum_{i=1}^m 2g_i'(x) \max(0, g_i(x)) + \sum_{j=1}^l 2h_j'(x)h_j(x).$$

Таким образом, для решения промежуточных задач безусловной оптимизации с такой $H(x)$ можно использовать любой алгоритм нулевого или первого порядка.

Пример. Вернемся к примеру, рассмотренному в прошлом пункте

$$\begin{cases} f(x) = x^2 \longrightarrow \min, \\ g(x) = x - 1 \leq 0. \end{cases}$$

Пусть $x_0 = 5$, $r_1 = 1$, $r_{k+1} = 10r_k$, $\varepsilon = 0.01$. Составляем функцию $H(x) = [\max(0, x - 1)]^2$.

На первом шаге нужно минимизировать функцию

$$\varphi(x, r_1) = x^2 + [\max(0, x - 1)]^2,$$

взяв в качестве начальной точки $x_0 = 5$. Подставив в $\varphi(x, r_1)$ $x = x_0 + \alpha = 5 + \alpha$, получим гладкую строго выпуклую функцию

$$\varphi(\alpha, r_1) = (5 + \alpha)^2 + [\max(0, 4 + \alpha)]^2,$$

поэтому ее минимум находится из уравнения

$$\varphi'(\alpha, r_1) = 2(5 + \alpha) + 2[\max(0, 4 + \alpha)] = 0.$$

Здесь может быть два случая

$$\begin{cases} \alpha \geq -4 \\ 2(5 + \alpha) + 2(4 + \alpha) = 0 \end{cases} \quad \text{либо} \quad \begin{cases} \alpha < -4 \\ 2(5 + \alpha) = 0 \end{cases}$$

Множество решений первой системы пусто. Из второй же получаем $\alpha = -5$, откуда $x(r_1) = 0$. Критерий остановки выполнен, так как $H(x(r_1)) = 0$. Поэтому $x^* = 0$.

Пример. Вернемся к задаче

$$\begin{cases} f(x) = x_1^2 + x_2^2 \longrightarrow \min, \\ g(x) = 2x_1 + x_2 + 4 \leq 0. \end{cases}$$

Возьмем $x^0 = (1, 1)^T$, $r_1 = 1$, $r_{k+1} = 10r_k$, $\varepsilon = 0.01$. Задачи безусловной оптимизации на каждом шаге будем решать с точностью $\varepsilon_1 = 0.001$. Имеем

$$\varphi(x, r_1) = f(x) + H(x) = x_1^2 + x_2^2 + [\max(0, 2x_1 + x_2 + 4)]^2, \quad x^{10} = x^0.$$

Здесь x^{ij} обозначает точку, полученную на j -ой итерации i -ой задачи безусловной оптимизации, каждую из которых будем решать с помощью метода наискорейшего градиентного спуска, взяв в качестве критерия остановки условие малости нормы градиента. Везде далее в целях экономии места приведены значения до шестого знака после запятой, хотя расчеты велись до пятнадцатого знака. Итак,

$$\varphi'(x, r_1) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} + 2 \max(0, 2x_1 + x_2 + 4) \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$x^{11} = x^{10} - \alpha_0 \varphi'(x^0, r_1) = \begin{pmatrix} 1 - 30\alpha_0 \\ 1 - 16\alpha_0 \end{pmatrix},$$

где $\alpha_0 = \operatorname{argmin} \varphi(\alpha, r_1)$,

$$\varphi(\alpha, r_1) = (1 - 30\alpha)^2 + (1 - 16\alpha)^2 + [\max(0, 7 - 76\alpha)]^2,$$

поэтому $\alpha_0 = 0.083381$, $x^{11} = (-1.501443, -0.334103)^T$, $\|\varphi'(x^{11}, 1)\| = \|(-0.350837, 0.657819)^T\| > \varepsilon_1$. Продолжая аналогично, далее получаем

$$x^{12} = \begin{pmatrix} -1.326629 \\ -0.661878 \end{pmatrix}, \quad \varphi'(x^{12}, 1) = \begin{pmatrix} 0.086197 \\ 0.0045972 \end{pmatrix}, \quad \|\varphi'(x^{12}, 1)\| > \varepsilon_1,$$

$$x^{13} = \begin{pmatrix} -1.333816 \\ -0.665711 \end{pmatrix}, \quad \varphi'(x^{13}, 1) = \begin{pmatrix} -0.001008 \\ 0.00189 \end{pmatrix}, \quad \|\varphi'(x^{13}, 1)\| > \varepsilon_1,$$

$$x^{14} = \begin{pmatrix} -1.333314 \\ -0.666653 \end{pmatrix}, \quad \varphi'(x^{14}, 1) = \begin{pmatrix} 0.000245 \\ 0.000131 \end{pmatrix}, \quad \|\varphi'(x^{14}, 1)\| < \varepsilon_1.$$

Таким образом, $x(r_1) = x^{14}$, но

$$H(x(r_1)) = 0.444512 > \varepsilon,$$

ввиду чего нужно продолжить вычисления, перейдя ко второй итерации.

Принимаем $x^{20} = x(r_1)$ и строим функцию

$$\varphi(\alpha, r_2) = f(x) + 10H(x) = x_1^2 + x_2^2 + 10[\max(0, 2x_1 + x_2 + 4)]^2.$$

$$x^{21} = \begin{pmatrix} -1.568629 \\ -0.784310 \end{pmatrix}, \quad \varphi'(x^{21}, 1) = \begin{pmatrix} 0.000003 \\ 0.000007 \end{pmatrix}, \quad \|\varphi'(x^{21}, 10)\| < \varepsilon_1.$$

Поэтому $x(r_2) = x^{21}$. Проверив критерий остановки

$$H(x(r_2)) = 0.006151 < \varepsilon,$$

закключаем, что $x^* = x(r_2)$.

В заключении этого пункта укажем на связь метода внешних штрафов и условий Куна-Таккера. Для задачи типа 4.2, которая рассматривалась в примерах, эти условия означают, что $-f'(x^*)$ раскладывается по градиентам активных ограничений $g'_i(x^*)$, $i \in R(x^*)$. Причем в силу их линейной независимости, такое разложение единственно. При выполнении условий теоремы 4.2 можно без ограничения общности считать, что $x(r_k) \rightarrow x^*$ при $k \rightarrow \infty$. Рассмотрим некоторое $j \notin R(x^*)$. Имеем $g_j(x^*) < 0$, поэтому в силу непрерывности

$$\exists N_j > 0 : \forall k \geq N_j \text{ выполнено } g_j(x(r_k)) < 0.$$

Взяв $N = \max_{j \notin R(x^*)} N_j$, получим

$$g_j(x(r_k)) < 0 \text{ то есть } \max(0, g_j(x(r_k))) = 0 \quad \forall j \notin R(x^*).$$

Точка $x(r_k)$ должна удовлетворять необходимому условию экстремума $\varphi'(x(r_k), r_k) = 0$, то есть

$$f'(x(r_k)) + \sum_{i=1}^n 2r_k g'_i(x) \max(0, g_i(x(r_k))) = 0,$$

которое при $k > N$ превратится в

$$f'(x(r_k)) + \sum_{i \in R(x^*)} 2r_k g'_i(x(r_k)) \max(0, g_i(x(r_k))) = 0.$$

Отсюда, ввиду единственности разложения антиградиента f по градиентам активных ограничений в точке x^* , приходим к выводу о том, что $2r_k \max(0, g_i(x(r_k)))$ стремятся при $k \rightarrow \infty$ к оптимальным множителям Куна-Таккера λ_i .

Действительно, в последнем примере

$$2r_2 \max(0, g(x(r_2))) = 1.56864,$$

что близко к истинному значению 1.6 оптимального множителя λ .

§ 4.3. Метод внутренних штрафов

Основное неудобство метода внешних штрафов связано с тем, что он генерирует последовательность точек $x(r_k)$, не принадлежащих допустимому множеству. То есть приближение к решению нашей задачи происходит извне допустимой области (см. второй пример прошлого пункта). Поэтому в [8] был предложен другой вариант метода штрафов, который выдает последовательность допустимых точек, то есть аппроксимирует оптимум изнутри допустимой области.

Итак, пусть

- X имеет непустую внутренность;
- каждая граничная точка множества X есть предел последовательности точек, лежащих внутри X .

Функцией внутреннего штрафа или барьерной функцией, будем называть функцию $B(x)$, которая

- неотрицательна в любой внутренней точке допустимого множества X ;
- стремится к $+\infty$ при приближении x к границе X .

Далее рассмотрим функцию

$$\psi(x, t) = f(x) + tB(x),$$

где $t > 0$ – коэффициент штрафа. Выбираем некоторое $t_1 > 0$, $x^1 = x^0 \in \text{int}X$, $\varepsilon > 0$, $\varepsilon_1 > 0$.

1. Пусть заданы $t_k > 0$, x^{k0} . Решаем задачу безусловной оптимизации $\psi(x, t_k)$ из начальной точки x^{k0} с точностью ε_1 . Полученное решение обозначаем $x(t_k)$. $B(x)$ создает барьер на границе

допустимого множества (ψ неограниченно возрастает при приближении к границе), поэтому всегда будем находиться в пределах X .

2. Проверяем условие $t_k B(x(t_k)) < \varepsilon$. Если оно выполнено, то принимаем $x^* = x(t_k)$, если нет, то выбираем новый коэффициент штрафа $0 < t_{k+1} < t_k$, новую начальную точку $x^{(k+1)0} = x(t_k)$, увеличиваем k на единицу и возвращаемся к первому пункту.

Условия сходимости указанного алгоритма дает

Теорема. Пусть $X = \{x \mid g_i(x) \leq 0\}$, $i = 1, \dots, m$ – допустимое множество задачи (4.2). Предположим, что X замкнуто, имеет непустую внутренность и что любая точка $x \in X$ есть предел последовательности точек, принадлежащих внутреннейности X . Пусть $B(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ – функция внутреннего штрафа, удовлетворяющая следующим условиям:

- ◇ $B(x) \geq 0 \quad \forall x \in \text{int}X$;
- ◇ $B(x) \rightarrow +\infty$ при x , стремящемся к границе X ;
- ◇ $B(x)$ непрерывна на $\text{int}X$.

Предположим, с другой стороны, что f – непрерывная функция и выполнено хотя бы одно из следующих двух условий:

- 1) $f(x) \rightarrow +\infty$ при $\|x\| \rightarrow +\infty$;
- 2) X ограничено.

Тогда при коэффициенте штрафа t , стремящемся к нулю, имеем:

– последовательность $x(t)$ имеет по крайней мере одну предельную точку, и каждая предельная точка последовательности $x(t)$ есть (глобальный) оптимум задачи (4.2);

– величина $tB(x(t))$ стремится к нулю.

Можно взять, например

$$B(x) = - \sum_{j=1}^m \frac{1}{g_j(x)}.$$

Необходимо отметить, что в ходе одномерной минимизации мы, вообще говоря, можем выйти за границы допустимой области. Поэтому нужно постоянно контролировать получаемые точки на допустимость и на уровне одномерной оптимизации предусмотреть специальные процедуры, гарантирующие, что очередная точка не выйдет из допустимого множества. В этом недостаток рассматриваемого метода по сравнению с методом внешних штрафов. Кроме

того, процесс расчетов нужно начинать из точки, принадлежащей внутренней допустимой области, однако поиск такой точки не всегда является тривиальной задачей.

Пример. Рассмотрим, уже знакомый пример

$$\begin{cases} f(x) = x^2 \longrightarrow \min, \\ g(x) = x - 1 \leq 0. \end{cases}$$

Возьмем $x^0 = -5$, $x^0 \in \text{int}X$, $t_1 = 1$, $t_{k+1} = t_k/10$, $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon_1 = 0.001$.

Итак,

$$\psi(x, t_k) = x^2 - t_k \frac{1}{x-1}.$$

Для решения задач безусловной оптимизации выберем метод наискорейшего градиентного спуска, а в качестве критерия остановки – малость нормы градиента.

$$\psi(x, 1) = x^2 - \frac{1}{x-1}, \quad \psi'(x, 1) = 2x + \frac{1}{(x-1)^2}.$$

$x^{10} = x^0 = -5$, $x^{11} = x^{10} - \alpha_0 \psi'(x^{10}, 1)$, где

$$\alpha_0 = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}} \psi(x^{10} - \alpha \psi'(x^{10}, 1), 1),$$

откуда

$$\alpha_0 = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}} (-5 + 9.972222\alpha)^2 - \frac{1}{-6 + 9.972222\alpha} = 0.471594,$$

а $x^{11} = -0.297157 \in \text{int}X$. Критерий остановки для вспомогательной задачи безусловной оптимизации $|\psi(x^{11}, 1)| = 10^{-6} < \varepsilon_1$ выполнен, значит $x(t_1) = x(1) = -0.297157$. Критерий же остановки основного алгоритма (метода внутренних штрафов) $|t_1 B(x(t_1))| = 0.770917 > \varepsilon$ не выполнен, поэтому переходим ко второй итерации.

Решаем задачу

$$\psi\left(x, \frac{1}{10}\right) = x^2 - \frac{1}{10(x-1)} \rightarrow \min, \quad x^{20} = x(1),$$

с точностью ε_1 . Получаем $x(t_2) = x(0.1) = -0.045723 \in \text{int}X$, $|t_2 B(x(t_2))| = 0.095628 > \varepsilon$.

Действуя аналогично далее решаем

$$\psi\left(x, \frac{1}{100}\right) = x^2 - \frac{1}{100(x-1)} \rightarrow \min, \quad x^{30} = x(0.1).$$

В результате $x(t_3) = x(0.01) = -0.004951 \in \text{int}X$, $|t_3 B(x(t_3))| = 0.009951 < \varepsilon$, откуда $x^* = x(t_3) = -0.004951$.

Отметим в заключении, что проводя рассуждения, аналогичные таковым в конце прошлого пункта, можно и здесь показать, стремление определенного выражения у оптимальным множителям Куна-Таккера:

$$t_k \left(\frac{1}{g_i(x(t_k))} \right)^2 \rightarrow \lambda_i, \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (4.4)$$

Действительно, в рассмотренном только что примере $t_3 \left(\frac{1}{x(t_3)-1} \right)^2 = 0.0099002$, что близко к истинному нулевому значению.

Подробнее о методах штрафа можно почитать, например в [9],[10].

Задания

1. *Покажите справедливость (4.4).*

§ 4.4. Метод условного градиента

Рассмотрим задачу выпуклого программирования

$$\begin{cases} f(x) \longrightarrow \min, \\ x \in X. \end{cases} \quad (4.5)$$

где $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ – выпуклая дифференцируемая на X функция, а множество $X \subset \mathbb{R}^n$ – выпуклый компакт. Начальную точку, принадлежащую X , обозначим x^0 . Попробуем модифицировать градиентный метод в данном случае так, чтобы он учитывал ограничения ($x \in X$).

Пусть задана точка $x^k \in X$. Разложение f в окрестности x^k

$$f(x) = f(x^k) + \langle f'(x^k), x - x^k \rangle + o(x - x^k).$$

Для линейной части приращения $f_k(x) = \langle f'(x^k), x - x^k \rangle$ с точностью до o -малого можем записать $f_k(x) = f(x) - f(x^k)$. Поэтому вначале вместо задачи (4.5) предлагается рассмотреть задачу

$$\begin{cases} f_k(x) \longrightarrow \min, \\ x \in X. \end{cases} \quad (4.6)$$

Так как $f_k(x)$ – линейная функция, то решение задачи (4.6), которое обозначим \bar{x}^k , будет лежать на границе X .

Если $\bar{x}^k = x^k$, это означает, что в любых направлениях, исходящих из x^k и не выводящих при достаточно малых шагах из допустимого множества X , функция f возрастает. Следовательно, в этом случае x^k и будет решением задачи (4.5).

Если же $\bar{x}^k \neq x^k$, то можем рассмотреть направление $p_k = \bar{x}^k - x^k$. Вдоль этого направления убывает линейная часть приращения $f_k(x)$, а значит обязательно найдется такое малое положительное α , что $f(x^k + \alpha p_k) < f(x^k)$. Кроме того, в силу выпуклости X и принадлежности x^k и \bar{x}^k допустимому множеству X , при $\alpha \in [0, 1]$ получим

$$x^k + \alpha p_k = x^k + \alpha(\bar{x}^k - x^k) = \alpha \bar{x}^k + (1 - \alpha)x^k \in X.$$

Таким образом, можно найти такое α_k , что

$$f(x^k + \alpha_k p_k) - f(x^k) < 0, \quad x^k + \alpha_k p_k \in X.$$

На практике α_k ищут обычно одним из двух способов:

1. $\alpha_k = \min\{1, \alpha_*\}$, где $\alpha_* = \operatorname{argmin}_{\alpha > 0} f(x^k + \alpha p_k)$;
2. (а) принимают $\hat{\alpha} = 1$, выбирают $\delta \in (0, 1)$,
 (б) проверяют $f(x^k + \alpha p_k) - f(x^k) < 0$,
 (с) если это условие выполнено, то полагают $\alpha_k = \hat{\alpha}$, если нет, то дробят $\hat{\alpha}$ с помощью δ (то есть принимают $\hat{\alpha} = \delta \hat{\alpha}$) и возвращаются к шагу (а).

Процесс продолжают до тех пор, пока не выполнится критерий остановки, в качестве которого можно, например, взять $\|f'(x^k)\| < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ – точность решения.

Если X – параллелепипед или шар, то вспомогательная задача (4.6) решается просто.

Пусть $X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, \dots, n\}$, тогда $\bar{x}^k = (\bar{x}_1^k, \dots, \bar{x}_n^k)$, где

$$\bar{x}_i^k = \begin{cases} a_i, & \text{если } \frac{\partial f(x^k)}{\partial x_i} \geq 0 \\ b_i, & \text{если } \frac{\partial f(x^k)}{\partial x_i} < 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

Пусть

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - a\| \leq r\}$$

шар радиуса r с центром в точке a , тогда

$$\bar{x}^k = a - r \frac{f'(x^k)}{\|f'(x^k)\|}. \quad (4.8)$$

Действительно,

$$\langle f'(x^k), x - x^k \rangle = \langle f'(x^k), x - a \rangle + \langle f'(x^k), a - x^k \rangle,$$

второе слагаемое – фиксированное число, первое же принимает минимальное значение (см. неравенство Коши-Буняковского) тогда и только тогда, когда вектор $x - a$ коллинеарен $f'(x^k)$, направлен противоположно ему и равен r по норме.

Пример. Пусть нужно решить задачу

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 \rightarrow \min \\ -1 \leq x_1 \leq 2 \\ -2 \leq x_2 \leq 1 \end{cases}$$

и $x^0 = (1, -1)^T$ – начальная точка.

Имеем $f'(x^0) = (2, -2)^T$. Составляем вспомогательную задачу

$$\begin{cases} 2(x_1 - 1) - 2(x_2 + 1) \rightarrow \min, \\ -1 \leq x_1 \leq 2, \\ -2 \leq x_2 \leq 1. \end{cases}$$

Из (4.7) следует, что $\bar{x}^0 = (-1, 1)^T$. Далее ищем точку x^1 в виде

$$x^0 + \alpha(\bar{x}^0 - x^0) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2\alpha \\ -1 + 2\alpha \end{pmatrix},$$

откуда

$$\alpha_0 = \operatorname{argmin}_{\alpha} ((1 - 2\alpha)^2 + (-1 + 2\alpha)^2) = \frac{1}{2} < 1.$$

Поэтому $x^1 = (0, 0)^T$. Ввиду того, что $\|f'(x^1)\| = \|(0, 0)^T\| = 0$, получим $x^* = x^1$.

Пример. Пусть нужно решить задачу

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 \longrightarrow \min, \\ (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 2)^2 \leq 8, \end{cases}$$

и $x^0 = (2, 2)^T$ — начальная точка.

Имеем $f'(x^0) = (4, 4)^T$. Составляем вспомогательную задачу

$$\begin{cases} 4(x_1 - 2) + 4(x_2 - 2) \longrightarrow \min, \\ (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 2)^2 \leq 8. \end{cases}$$

Из (4.8) следует, что

$$\bar{x}^0 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} - 2\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Далее ищем точку x^1 в виде

$$x^0 + \alpha(\bar{x}^0 - x^0) = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - 2\alpha \\ 2 - 2\alpha \end{pmatrix},$$

откуда

$$\alpha_0 = \operatorname{argmin}_{\alpha} ((2 - 2\alpha)^2 + (2 - 2\alpha)^2) = 1.$$

Поэтому $x^1 = (0, 0)^T$. Ввиду того, что $\|f'(x^1)\| = \|(0, 0)^T\| = 0$, получим $x^* = x^1$.

Задания

1. *Покажите, что если f – выпуклая функция, то множество $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^0)\}$ также выпуклое.*
2. *Может ли и в каких случаях α_* (см. первый способ определения α_k) получиться равным нулю?*
3. *Подумайте, почему выбор $\alpha_k = \min\{1, \alpha_*\}$ (при $\alpha_* \neq 0$) гарантирует выполнение неравенства $f(x^k + \alpha_k p_k) < f(x^k)$.*

Автор надеется, что материал пособия был полезен и интересен читателю. Предложения и пожелания направляйте по адресу: majid.abbasov@gmail.com

ЛИТЕРАТУРА

1. *Васильев Ф.П.* Методы оптимизации. М.: Факториал Пресс, Гл. ред. физ.-мат. лит., 2002.– 824 с.
2. *Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М.* Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. – 320 с.
3. *Мину М.* Математическое программирование. Теория и алгоритмы. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. 488 с.
4. *Моисеев Н.Н., Иванов Ю.П., Столярова Е.М.* Методы оптимизации. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978. 352 с.
5. *Гилл Ф., Моррей У., Райт М.* Практическая оптимизация. Пер. с англ. — М.: Мир, 1985. 509 с.
6. *Аоки М.* Введение в методы оптимизации. М.: Наука, 1977. 334 с.
7. *Сухарев А. Г., Тимохов А. В., Федоров В. В.* Курс методов оптимизации: Учеб. пособие. — 2-е изд. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 368 с.
8. *Фиакко А., Мак-Кормик Г.* Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации. М.: Мир, 1972. 240 с.
9. *Евтушенко Ю.Г.* Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. М.: Наука, 1982. 432 с.
10. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 536 с.
11. *Ефимов А.В., Поспелов А.С.* Сборник задач по математике для втузов. В 4-х ч. ч. 3. М.: Физматлит, 2002. 576 с.