МГТУ имени Н.Э. Баумана
Кафедра ИУ-1 «Системы автоматического управления»

Методы вычислений

Численные методы поиска экстремумов функций

Андрей Леонидович Масленников
amas@bmstu.ru

2023 г.

Численные методы поиска экстремумов функций

Оптимизация

Задача оптимизации → Метод оптимизации → Метод поиска экстремума функции

Задача оптимизации — это задача при решении которой требуется добиться минимума (реже максимума) некоторого критерия при заданных ограничениях.

Метод оптимизации — это, фактически, математическая постановка задачи оптимизации в которой задается критерий $\mathbf{J}$, теоретически показываются и обосновываются, доказываются свойства сходимости, точности и др.

Численный метод поиска экстремума функции — это вычислительный алгоритм, который позволяет подобрать такой $\mathbf{x}$, при котором достигается $\mathbf{J}_{\min}$

Векторная форма постановки задачи

критерий

решение

$$\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\in\chi} \left\| \mathbf{J}(\mathbf{x}) \right\| = \arg\min_{\mathbf{x}\in\chi} \sum_k J_k(\mathbf{x})$$

область допустимых значений аргумента

Численные методы поиска экстремумов функций

Классификация

по типу поиска $\mathbf{x}$:
- локальные;
- глобальные.

по характеру задачи оптимизации:
- детерминированные;
- стохастические;
- смешанные.

по гладкости $f(\mathbf{x})$ и существованию производных:
- прямые;
- первого порядка — требуется знание $\nabla f(\mathbf{x})$;
- второго порядка — требуется знание $\nabla^2 f(\mathbf{x})$.

одномерные:
- метод полного перебора;
- метод дихотомии;
- метод золотого сечения;
- и другие.

прямые:
- метод Гаусса;
- метод Хука—Дживса;
- метод Нелдера—Мида;
- и другие.

первого порядка:
- метод покоординатного спуска;
- метод градиентного спуска;
- метод наискорейшего спуска.

второго порядка:
- метод Ньютона;
- метод Ньютона—Рафсона;
- квази-Ньютоновские методы;
- метод Левенберга—Марквардта;
- и другие.

Методы поиска экстремумов скалярных функций

Метод полного перебора

Метод полного перебора — это метод поиска экстремума функции, в котором в интервале поиска $[a, b]$ формируется n равноотстоящих точек значений аргумента x, для которых последовательно вычисляются значения функции $f(x)$, после чего из полученного набора выбирается минимальное значение $f_{\min}(x_{\min})$ и соответствующее значение аргумента $x_{\min}$.

while $k < n$

$$x_k = a + k\frac{b-a}{n+1}$$

if $f(x_k) < f_{\min}(x)$

$$f_{\min}(x) = f(x_k)$$

$$x_{\min} = x_k$$

end

$$k = k + 1$$

end

Точность поиска экстремума составляет

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\frac{b-a}{n}$$

Метод крайне вычислительно не эффективен

Методы поиска экстремумов скалярных функций

Метод дихотомии

Метод дихотомии — это метод поиска экстремума функции, в котором интервале поиска $[a, b]$ после каждой итерации уменьшается в два раза

Критерий остановки

$$|b-a|<\varepsilon$$

Значение δ

$$\delta \in \left(0, \frac{b-a}{2}\right)$$

while $|b-a|>\varepsilon$

$$x_k = \frac{a+b}{2}$$

if $f(x_k-\delta) \geq f(x_k+\delta)$

$$a = x_k$$

else

$$b = x_k$$

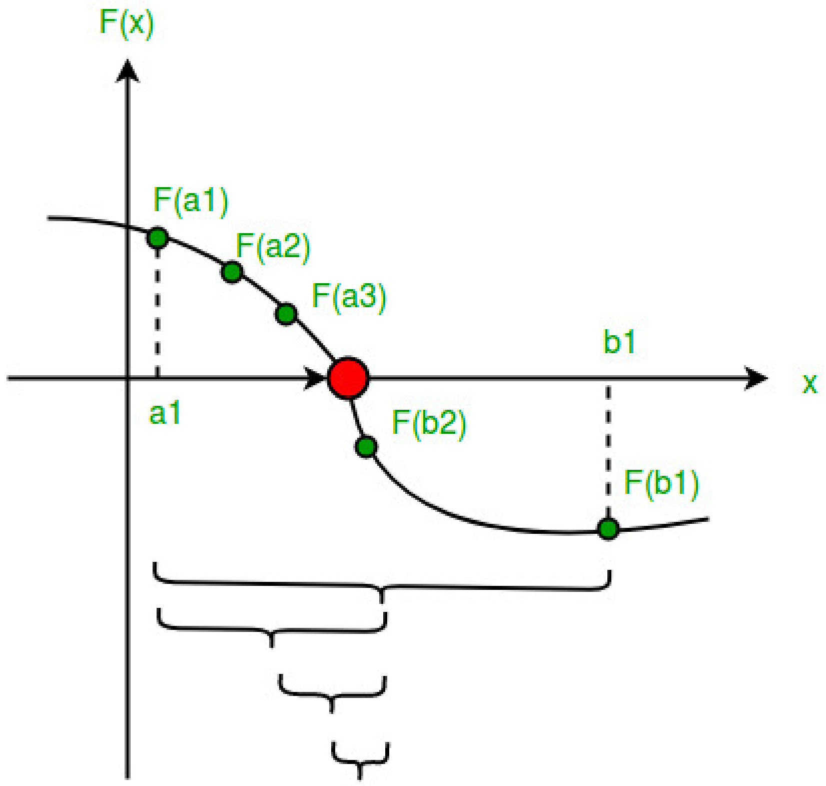
end

$$k = k+1$$

end

$$x_{\min} = \frac{a+b}{2}$$

$$f_{\min} = f(x_{\min})$$



Методы поиска экстремумов скалярных функций

Метод дихотомии. Пример

Начальные условия

$$f(x) = (x-1)^2$$

$$[a,b] = [0.0, 1.5]$$

$$\varepsilon = 0.1$$

$$\delta = \frac{b-a}{4}$$

Таблица решения

a	b	δ	x	$f(x-\delta)$		$f(x+\delta)$	$\lvert b-a \rvert$
0	1.500	0.3750	0.7500	0.3906	>	0.0156	0.7500
0.7500	1.500	0.1875	1.1250	0.0039	<	0.0977	0.3750
0.7500	1.1250	0.0938	0.9375	0.0244	>	0.0010	0.1875
0.9375	1.1250	0.0469	1.0313	0.0002	<	0.0061	0.0938
0.9375	1.0313						

меньше ε

Итоговое решение

$$x_{\min} = \frac{0.9375 + 1.0313}{2} = 0.9844$$

$$f(x_{\min}) = 0.0002$$

Методы поиска экстремумов скалярных функций

Метод золотого сечения

Метод золотого сечения — это метод поиска экстремума функции, в котором интервал поиска $[a, b]$ после каждой итерации уменьшается пропорционально числу φ.

Критерий остановки

$$|b-a| < \varepsilon$$

Значение φ

$$\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.62$$

$$x_1 = b - \frac{b-a}{\varphi}$$

$$x_2 = a + \frac{b-a}{\varphi}$$

$$
\begin{array}{llll}
\textbf{while} & |b-a| > \varepsilon & & \\
\quad \textbf{if} & f(x_1) \geq f(x_2) & & \\
 & a = x_1, & x_1 = x_2, & x_2 = \ldots \\
\quad \textbf{else} & & & \\
 & b = x_2, & x_2 = x_1, & x_1 = \ldots \\
\quad \textbf{end} & & & \\
\textbf{end} & & &
\end{array}
$$

$$x_{\min} = \frac{a+b}{2}$$

$$f_{\min} = f(x_{\min})$$

Методы поиска экстремумов скалярных функций

Метод золотого сечения. Пример

Начальные условия

$$f(x) = (x-1)^2$$

$$[a,b] = [0.4, 1.5]$$

$$\varepsilon = 0.1$$

Таблица решения

a	b	x_1	x_2	$f(x_1)$		$f(x_2)$	$\lvert b-a \rvert$
0.4000	1.5000	0.8202	1.0798	0.0323	>	0.0064	0.6798
0.8202	1.5000	1.0798	1.2403	0.0064	<	0.0578	0.4202
0.8202	1.2403	0.9807	1.0798	0.0004	>	0.0064	0.2597
0.8202	1.0798	0.9193	0.9807	0.0065	<	0.0004	0.1605
0.9193	1.0798	0.9807	1.0185	0.0004	>	0.0003	0.0992
$\boxed{0.9807}$	$\boxed{1.0798}$						

меньше ε

Итоговое решение

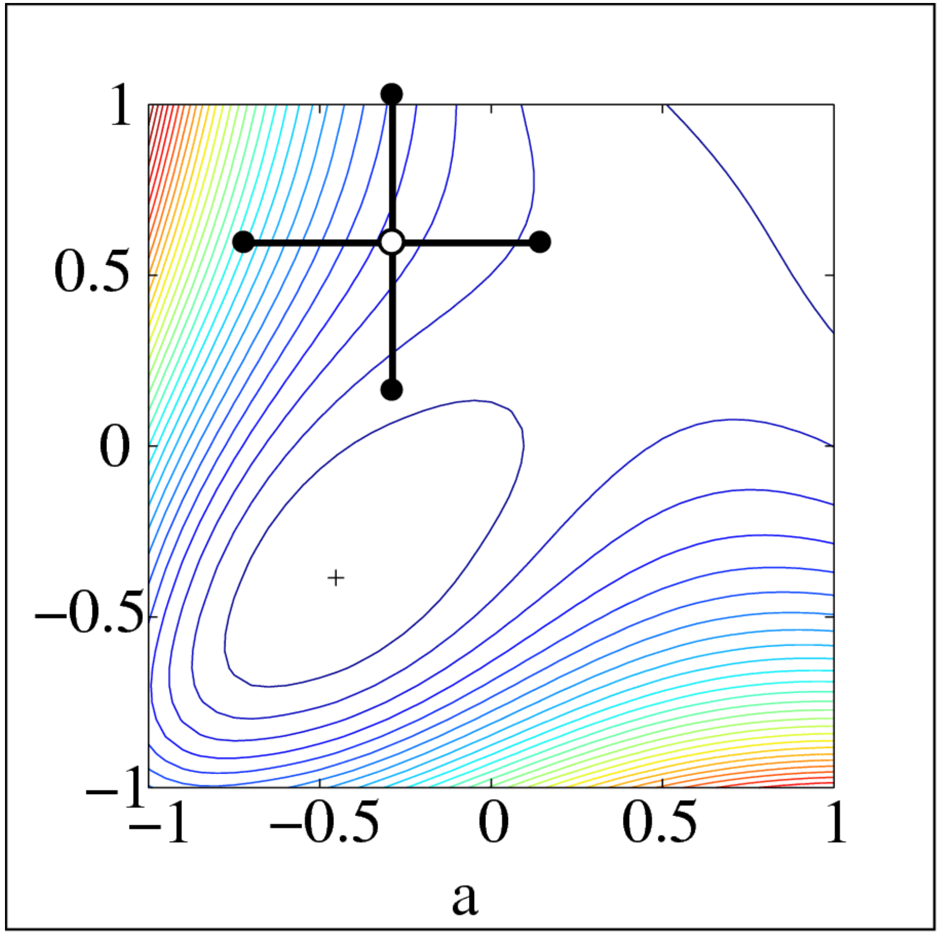
$$x_{\min} = \frac{0.9807 + 1.0798}{2} = 1.0302$$

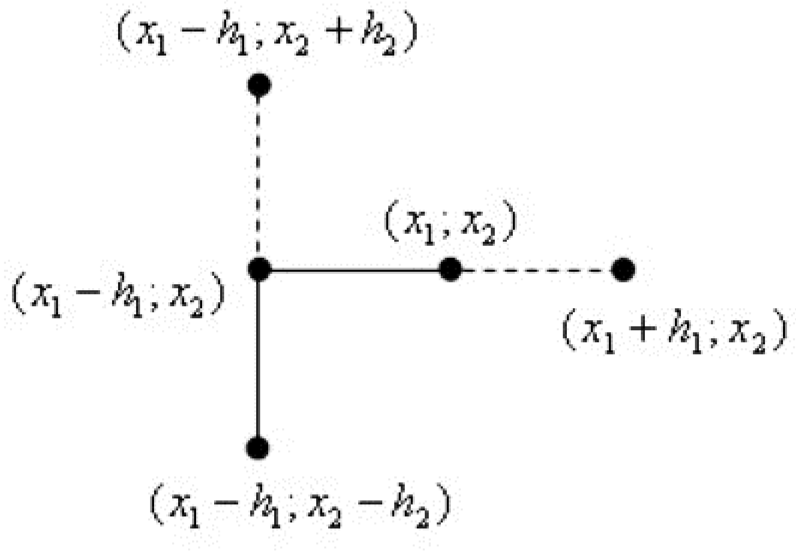
$$f(x_{\min}) = 9.1469 \times 10^{-4}$$

Методы поиска экстремумов функций нескольких переменных

Метод Хука—Дживса (pattern search)

Метод Хука—Дживса — это метод n-мерной сетке вычисляются значения функции в точках, отстающих от заданной базовой точки на величину λ, последовательно по каждой координате с перемещением в точку с минимальным значением функции. λ для каждого x_i постепенно уменьшается.





Методы поиска экстремумов функций нескольких переменных

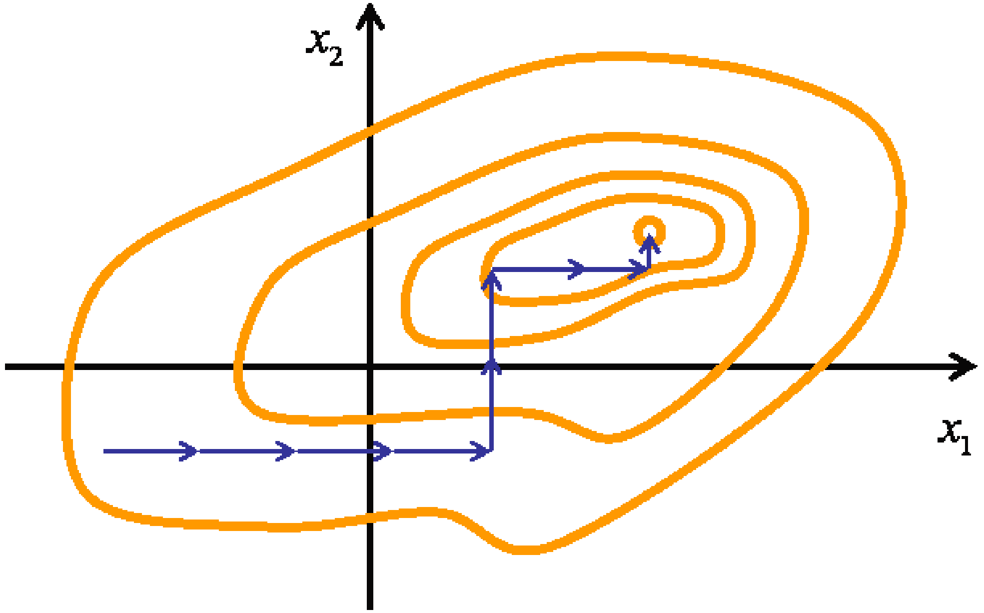
Метод Гаусса

Формируется итерационный процесс на каждой k-ой итерации которого последовательно по каждой компоненте вектора $\mathbf{x}$ сдвигается базовая точка:

$$x_{i,k} = x_{i,k-1} + \lambda_{i,k} e_i$$

где e_i — формируют ортонормированный базис, а $\lambda_{i,k}$ находится решением своей оптимизационной задачи

$$\lambda_{i,k} = \arg\min_{\lambda_{i,k}} f\left(x_{i,k-1} + \lambda_{i,k} e_i\right)$$



Отличительная особенность метода состоит в том, что направление движения по каждой координате — фиксировано

Метод покоординатного спуска

$$x_{i,k} = x_{i,k-1} + \lambda_{i,k} \nabla f_i(\mathbf{x}_{k-1})$$

как в методе Гаусса, только направление поиска не постоянно, а определяется градиентом

Метод градиентного спуска

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

движение к минимуму идет сразу по всем координатам одновременно

где

λ_k — шаг перехода в сторону минимума;

$\nabla f(\mathbf{x_k})$ — вектор градиентов функции, который определяется как

$$\nabla f(\mathbf{x}_k) = -\left.\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i}\right|_{\mathbf{x}_k}$$

Варианты задания λ

$\lambda = \mathrm{const}$

(как в методе Гаусса, но может расходиться)

$\lambda_k = \frac{\lambda_{k-1}}{p}$

(уменьшается с каждым шагом, следовательно может не сходиться к минимуму)

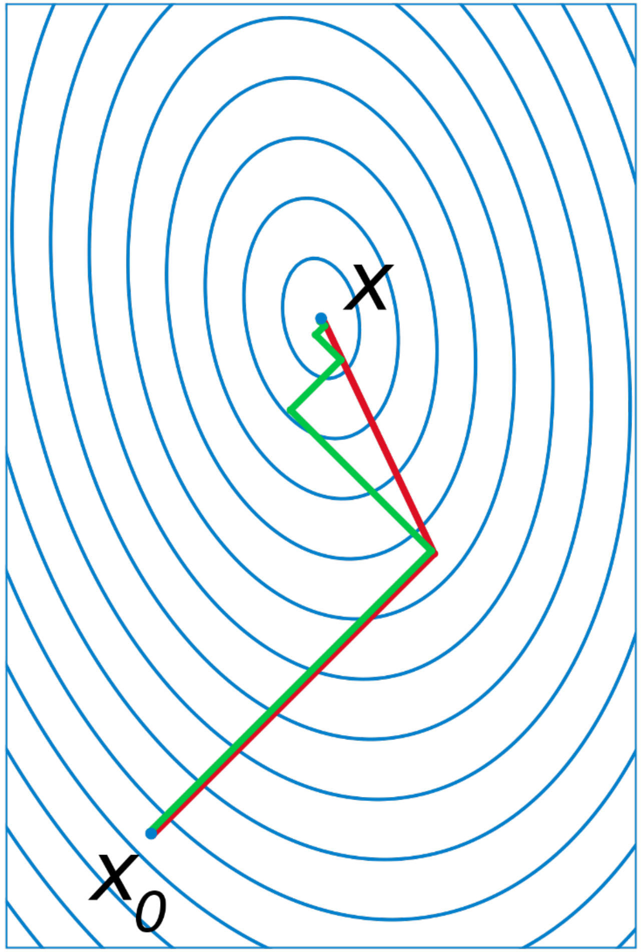
$$\boxed{\lambda_k = \underset{\lambda_k}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}_{k-1} + \lambda_k \nabla f(\mathbf{x}_{k-1}))}$$

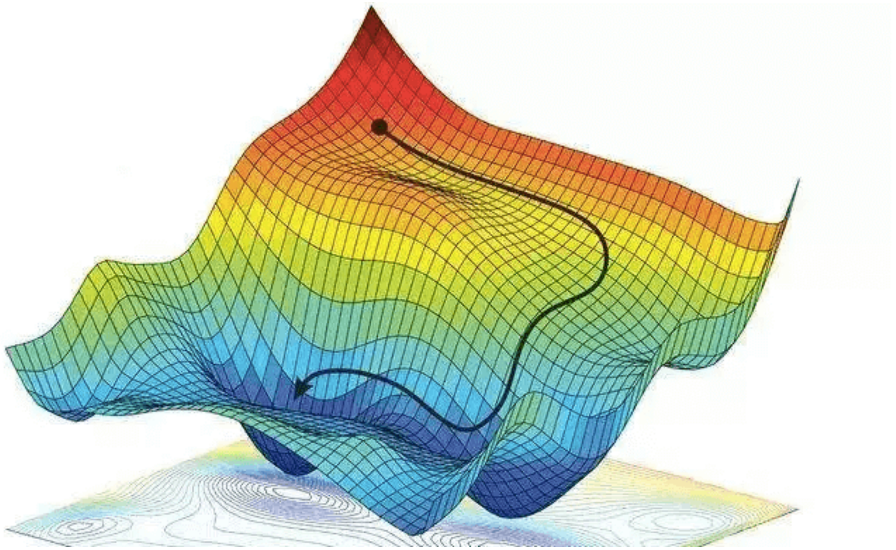
(решается через скалярную задачу оптимизации)

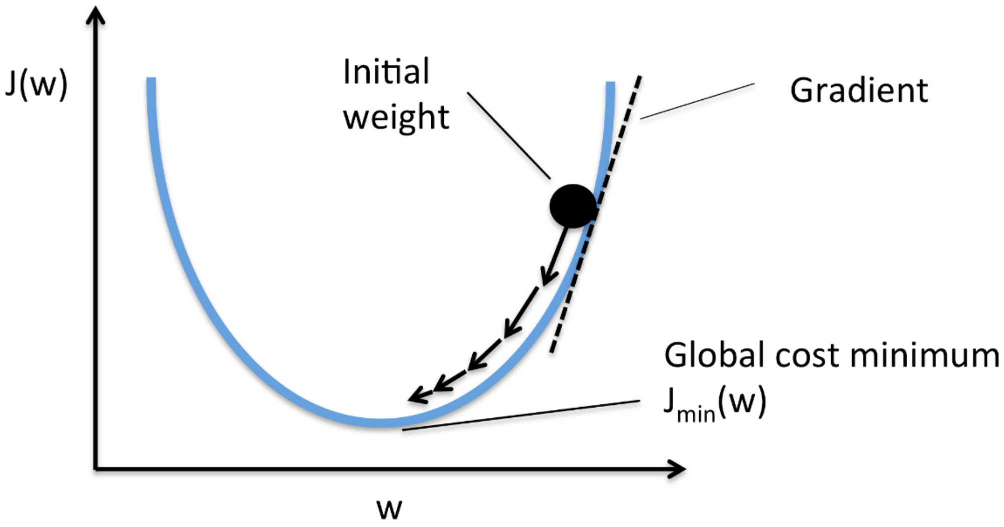
только в этом случае градиентный метод называется **методом наискорейшего спуска**

Методы поиска экстремумов функций нескольких переменных

Методы первого порядка







Алгоритм покоординатных методов

$$
\begin{aligned}
&\textbf{while}\ \ criteia\ \ ok\\
&\quad \textbf{for}\, i = i : n\\
&\qquad \nabla f_i(\mathbf{x}_k) = \ldots\\
&\qquad \lambda_{i,k} = \ldots\\
&\qquad x_{i,k} = \ldots\\
&\quad \textbf{end}\\
&\quad k = k+1\\
&\textbf{end}
\end{aligned}
$$

Алгоритм непокоординатных методов

$$
\begin{aligned}
&\textbf{while}\ \ criteia\ \ ok\\
&\quad \nabla f(\mathbf{x}_k) = \ldots\\
&\quad \lambda_k = \ldots\\
&\quad \mathbf{x}_k = \ldots\\
&\quad k = k+1\\
&\textbf{end}
\end{aligned}
$$

Выход по значению функции

$$\left| f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1}) \right| < \varepsilon_f$$

Выход по значению аргумента

$$\left\| \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1} \right\| < \varepsilon_x$$

Выход по объему вычислений

$$k > k_{\max}$$

$$\boxed{k_f > k_{f,\,\max}}$$

максимальное количество вычислений значений функции $f(\mathbf{x}_k)$

Методы поиска экстремума функций нескольких переменных

Методы второго порядка

> ***Методы второго порядка*** — это метод поиска экстремума функции нескольких переменных, шаг поиска минимума в которых определяется матрицей Гессе
>
> $$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_{k-1})\nabla f(\mathbf{x}_{k-1})$$

Матрица Гессе

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}_k) = \left.\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1{}^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}\right|_{\mathbf{x}_k}$$

Метод Ньютона—Рафсона

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k)\nabla f(\mathbf{x}_k)$$

а λ_k находится решением оптимизационной задачи:

$$\boldsymbol{\lambda}_k = \arg\min_{\boldsymbol{\lambda}_k} f\left(\mathbf{x}_k + \boldsymbol{\lambda}_k \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k)\nabla f(\mathbf{x}_k)\right)$$

Проблемы применения методов второго порядка

- вычисление матрицы Гессе;

(большой объем вычислений, особенно если численно)

- вычисление обратной матрицы Гессе;

(большой объем вычислений, потенциальная неустойчивость)

Квази-Ньютоновские методы

Методы оптимизации

Метод наименьших квадратов

Методы наименьших квадратов — это оптимизации, в котором минимизируется среднеквадратичная величина ошибки

$$\sum_i e^2 = \sum_i (f(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 \to \min$$

Аппроксимация экспериментальных данных — это численный подбор параметров (вектор θ) функции $f(\theta, t)$, наиболее точно описывающих (повторяющих) характер изменения набора данных $y(t)$, полученного экспериментально.

$$\theta = \arg\min_{\theta \in \Theta} \sum_i \left(f(\theta, t_i) - y_i(t_i) \right)^2$$