

О. А. Юдин, аспирант

ПОИСК МИНИМУМА ФУНКЦИЙ, КОТОРЫЕ ИМЕЮТ РАЗРЫВЫ ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Проанализированы возможные варианты решения задачи поиска минимума функции, которая имеет разрыв частной производной, разработано и обосновано метод оптимизации первого порядка для решения поставленной задачи.

Ключевые слова: методы оптимизации, экстремум функции, минимум функции, градиент, наискорейший спуск, правило Армихо, сопряжённые градиенты, разрыв производной.

Актуальность

Современные методы оптимизации способны решать большое количество задач, которые можно свести к поиску экстремума определённой целевой функции. Среди основных задач можно выделить такие: непосредственно поиск минимума (максимума) определённой целевой функции критерия, решение систем линейных уравнений с большим числом неизвестных, решение задач аппроксимации.

При решении более сложных математических задач существует необходимость расширить применение методов оптимизации на разные виды целевых функций, поиск экстремума которых невозможно производить при помощи существующих методов. Суть численных методов оптимизации в постепенном приближении к экстремуму целевой функции с каждым следующим шагом (итерацией), начиная с определённого начального приближения (или интервала поиска).

Существует много разных методов оптимизации и их модификаций. Все методы можно разделить на три группы:

- методы нулевого порядка (дихотомии, золотого сечения, Фибоначчи, и др.);
- методы первого порядка (метод градиентного спуска, наискорейшего градиентного спуска, сопряжённых градиентов);
- методы второго порядка (метод Ньютона).

В соответствии с порядком метода используются значения целевой функции, первые частные производные (градиент функции) и вторые частные производные (гессиан функции). Модификации этих методов позволяют уменьшить количество итераций (или свести их к конечному количеству для определенных видов целевых функций) для нахождения экстремума целевой функции.

Целью данного исследования является расширение области применения методов оптимизации для поиска минимума функций, которые имеют разрывы частных производных.

Задачей исследования является разработка метода первого порядка, который позволит оптимизировать функции имеющие разрывы частных производных первого рода, которые проходят через точку минимума.

Попробуем применить известные методы для решения поставленной задачи. Методы нулевого порядка не применяются на практике для решения многомерных задач из-за небольшого коэффициента сходимости относительно методов высших порядков.

Среди методов первого порядка следует обратить внимание на метод самого быстрого спуска. Данный метод заключается в последовательности расчёта антиградиента функции на определенном шаге и линейном поиске в этом направлении. Повторение итерации осуществляется до достижения определенной заданной точности [1, 2]. Если функция имеет криволинейную (или прямолинейную) линию разрыва первой частной производной, которая проходит через локальный минимум, то данный метод сходится к первому пересечению с

линией разрыва.

В результате исследования было установлено, что эффективность этого метода для решения данной задачи можно повысить, используя нечеткий линейный спуск, а именно – правило Армихо (Armijo rule) [3]. Правило Армихо и принцип его действия изображен на рисунке 1. Это можно объяснить тем, что данное правило позволяет быстро, но не точно, вычислять минимум на стадии линейного поиска, этим самым дает возможность уточнения градиента до достижения разрыва. Но для функций такого рода с большим числом аргументов, этот подход тоже не достаточно эффективен: часто имеет те же недостатки, что и подход с использованием точного линейного поиска. Также этот метод является довольно медленным и нуждается в большом количестве итераций, особенно для решения многомерных задач.

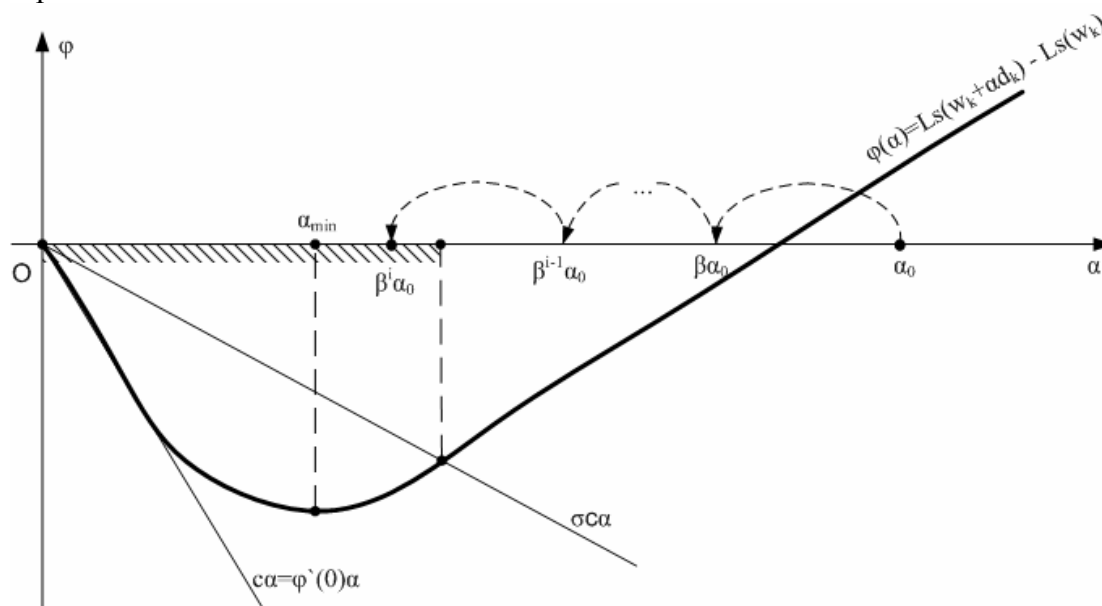


Рис. 1. Правило Армихо

Еще один метод первого порядка, нашедший широкое применение, – метод сопряженных градиентов. Одним из его преимуществ является то, что он имеет малое и конечное количество итераций для поиска минимума квадратичных функций с положительно-определенной матрицей линейного преобразования. Данный метод имеет две модификации согласно с алгоритмами вычисления сопряженного направления: метод Флетчера–Ривса и Полака–Рибьера [1, 4]. При применении этого метода к решению задачи с разрывом первой частной производной оказалось, что алгоритм начинает разбегаться после достижения линии разрыва из-за неверного вычисления на ней сопряженного направления.

Среди методов второго порядка метод Ньютона имеет дополнительные ограничения на вид функции и требует вычисление матрицы Гессе, что не всегда является возможным и целесообразным с точки зрения быстродействия [1].

Математическая модель

Исходя из анализа и исследования существующих методов, их область применения не распространяется на функции, которые имеют разрывы частных производных первого рода.

Исследования существующих методов выявило такие основные проблемы: расхождение и остановка алгоритмов происходят на границе разрыва частной производной. Следовательно, если точка минимума находится на этой границе, то при ее достижении последующее движение нужно осуществлять вдоль границы. Направление такого движения можно задать как интерполяцию нескольких точек, которые находятся на границе. Вычисление этих точек можно сделать с помощью метода наискорейшего градиентного

спуска.

Исходя из этого, в разработанном методе предлагается выбрать три начальных приближения и в последующих итерациях суживать полученный треугольник в направлении минимума функции. Выбор точек осуществляется вблизи локального минимума функции таким образом, чтобы линии градиентов любых двух точек не накладывались.

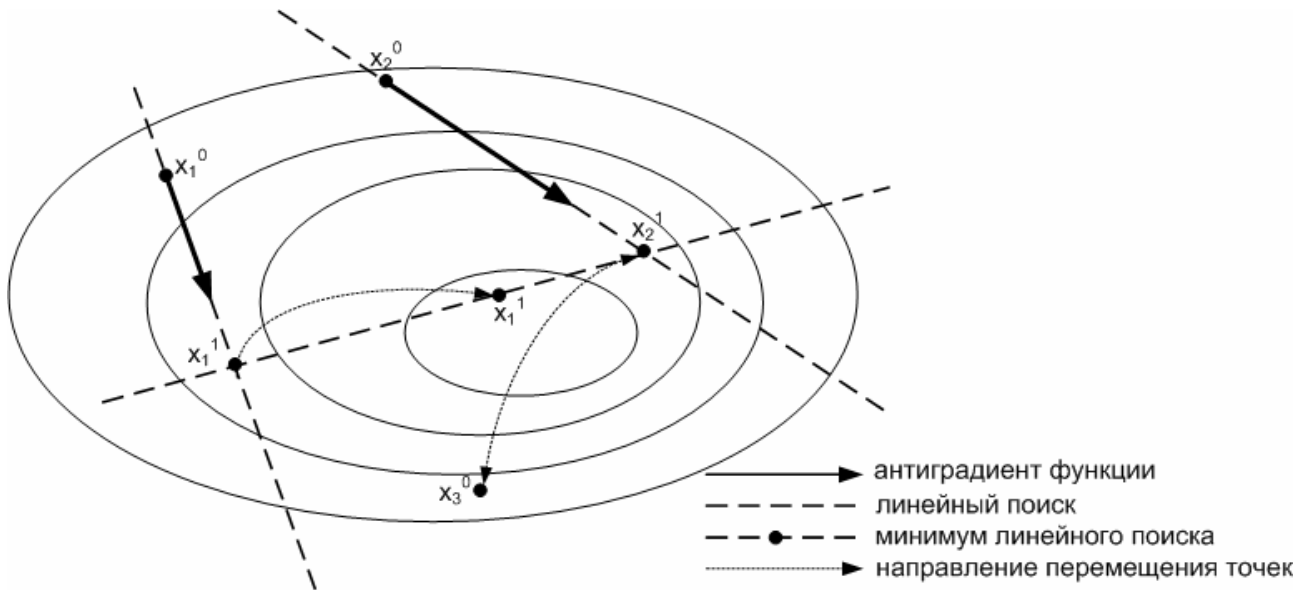


Рис. 2. Первый шаг метода

После выбора трёх приближений среди них выбираются две точки x_1 и x_2 и проводится линейный поиск в направлении антиградиентов функции в этих точках:

$$d_i^k = -\nabla f(x_i^k), \quad (1)$$

где f – функция, минимум которой нужно найти; d_i^k – направление линейного поиска; x_i^k – k -ое приближение i -ой начальной точки.

Линейный поиск можно проводить, используя метод Ньютона для функции одной переменной (2).

$$\alpha_i^k = \arg \min_{\alpha} (f(x_i^k + \alpha \cdot d_i^k)). \quad (2)$$

Метод Ньютона для одномерной задачи базируется на аппроксимации функции параболой в точке приближения и перемещении аргумента в точку минимума параболы. Аппроксимация выполняется с помощью разложения функции в степенной ряд Тейлора, коэффициентами которого являются первая и вторая производная функции в исходной точке. Производные функции в выбранном направлении находят численно, используя разностные формулы. Из-за того, что метод Ньютона применяется для нахождения минимума функции с непрерывной частной производной, необходимо наложить соответствующие условия для его применения для решения задачи [1]. Таким условием является то, что разностный шаг метода не должен превышать заданную точность метода. Это условие обеспечивает корректный разностный расчёт первой и второй производной, для точки, находящейся возле линии разрыва производной функции.

Новое приближение находится по формуле (3).

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \alpha_i^k \cdot d_i^k. \quad (3)$$

После нахождения следующих приближений для выбранных точек проводится линейный поиск в направлении d^k по линии $(x_1^k \ x_2^k)$ с начальным приближением x^k которое отвечает

меньшему из двух значений функции:

$$d^k = x_2^k - x_1^k, \tag{4}$$

$$x^k = \arg \min_x (f(x_2^k), f(x_1^k)).$$

Полученный в результате линейного поиска минимум заменяет приближение x_1^k или x_2^k в зависимости от того, значение функции в котором больше, а другое приближение меняется местами с тем, которое осталось, – x_3 . Процесс первой итерации изображен на рисунке 2.

Разработанный метод можно также применять для решения задач поиска минимума обычных непрерывных многомерных функций. Он требует достаточно небольшое количество итераций и имеет такую же конечную сходимость для квадратичных функций, как и метод сопряженных градиентов. Общий алгоритм метода изображен на рисунке 3.

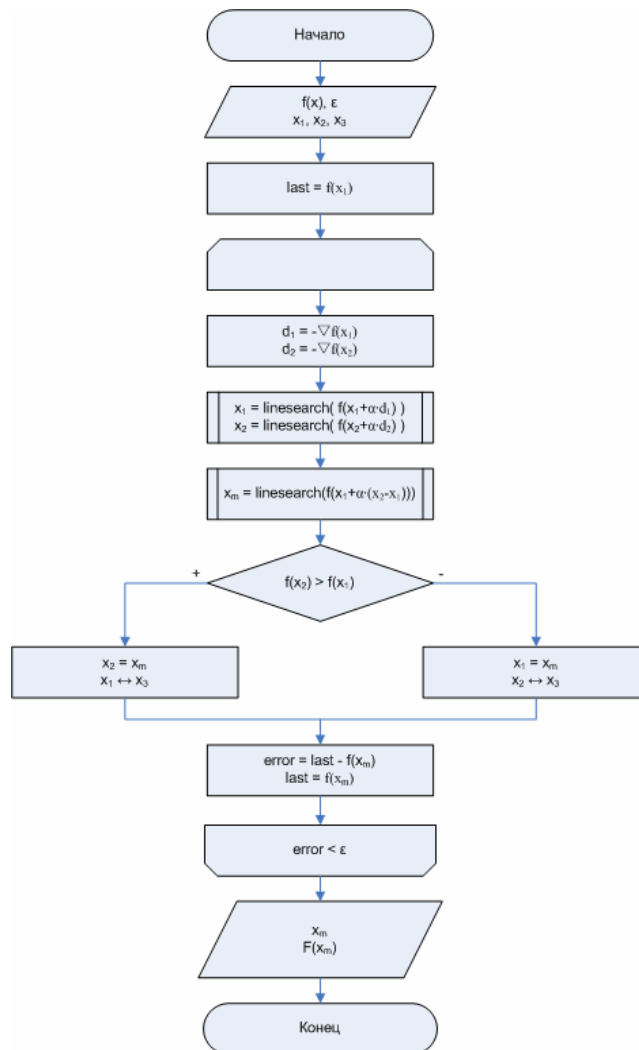


Рис. 3. Алгоритм работы метода оптимизации

Выводы

В результате исследования был разработан метод оптимизации первого порядка, позволяющий находить минимум функций, которые имеют разрывы первой частной производной первого рода. Также на основе метода был создан алгоритм и соответствующее программное обеспечение в виде набора функций математического пакета прикладных программ MATLAB. Разработанный алгоритм является общим и может быть применен для поиска минимума функций с непрерывными частными производными. Этот метод можно

применять в задачах многомерной интерполяции и аппроксимации, решение которых строится по критерию наименьшего квадрата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пантелеев А.В. Методы оптимизации в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 2005. – 544 с.
2. Н. З. Шор. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложение. – К.: Наукова думка. – 1979. – 199 с.
3. С. Т. Kelley. Iterative Methods for Optimization. – SIAM: Philadelphia, 1999. – P.40–43
4. Метод сопряженных градиентов – математический аппарат [Электронный ресурс] / Н. Некипелов. – Режим доступу.: <http://www.basegroup.ru/library/analysis/neural/conjugate/> (01 июля 2008).

Юдин Олег Александрович – аспирант кафедры автоматки и информационно-вычислительной техники, yudin_oleh@ukr.net.

Винницкий национальный технический университет.