ТЕМА 3. МЕТОДЫ МНОГОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Задача оптимизации в целом сводится к задаче поиска экстремума (минимума или максимума) целевой функции с заданными ограничениями. Её математическая постановка выглядит следующим образом: необходимо определить значения вектора переменных $x = (x_1, x_2, \ldots, x_m)$, которые удовлетворяют ограничениям вида:

$$g_i(x_1, x_2, \ldots, x_m) \leq b_i \tag{1}$$

для всех $i = 1, \ldots, k$ и при которых достигается максимум или минимум целевой функции $f(x_1, x_2, \ldots, x_m)$:

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_m) \to (\max, \min).$$

Допустимым решением задачи называется такое решение, которое удовлетворяет ее ограничениям (1). Совокупность допустимых решений задачи называют областью допустимых решений (ОДР)D. Окончательным решением задачи является пара $(x^*, f^*(x^*))$, состоящая из оптимального решения и оптимального значения целевой функции.

Методы математического программирования дают большое разнообразие алгоритмов решения данной задачи. В целом алгоритмы поиска реализуют методы спуска к экстремуму, при которых значение целевой функции последовательно улучшается вплоть до достижения экстремума. В зависимости от возможности нахождения алгоритмом локального либо глобального экстремума, они делятся на алгоритмы локального и глобального поиска.

Алгоритмы поиска локального экстремума предназначены для определения одного из локальных экстремумов на множестве допустимых решений, в котором целевая функция принимает максимальное или минимальное значение. При их построении могут использоваться как детерминированный спуск в область экстремума, так и случайный поиск. Среди детерминированных методов различают методы нулевого порядка и градиентные (1-го и 2-го порядка). Первые основаны на вычислениях только значений оптимизируемой функции. Вторые используют частные производные соответствующего порядка. Для поиска экстремума в случаях, когда вид оптимизируемой функции известен не полностью, либо ее структура слишком сложна, применяются методы стохастического программирования или нейронных сетей. Эффективность процедуры поиска оптимума – возможность отыскания решения и сходимость к решению по скорости зависят от вида функции и применяемого для нее метода. Рассмотрим стратегию каждого метода более подробно, исследуя для определенности минимизацию целевой функции.

Методы нулевого порядка (прямые методы)

Из прямых методов наиболее известны методы:

- координатного спуска – поочередная оптимизация параметров вдоль осей одним из известных одномерных методов;
- спирального координатного спуска;
- вращающихся координат (метод Розенброка);
- поиска по симплексу;
- Хука–Дживса с поиском по образцу и др.

Метод координатного спуска заключается в том, что в качестве направлений траектории спуска от предыдущей точки поиска $X^{(k-1)}$ к последующей $X^{(k)}$ принимаются поочередно направления координатных осей $x_i (i = 1, 2, \ldots, n)$. После спуска на один шаг по координате x_1 происходит переход к спуску на один шаг по координате x_2, а затем движение вдоль координаты x_3 и т.д., пока не будет найдена следующая точка поиска $X^{(k)}$ с координатами $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$. Движение по траектории спуска от предыдущей точки $X^{(k-1)}$ к последующей $X^{(k)}$ продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты окрестности точки минимума X^* целевой функции, определяемые точностью вычислений. Для поиска координат точки $X^{(k)}$

на каждом шаге итерации можно использовать любой из методов одномерной минимизации: метод золотого сечения, метод деления отрезка пополам, метод интерполяции-экстраполяции и др.

Метод спирального координатного спуска отличается от рассмотренного выше лишь тем, что шаг h меняется каждый раз при переходе от поиска минимума по одной переменной к поиску минимума по другой переменной. В трехмерном пространстве это напоминает спуск во впадину по спирали. Обычно этот метод дает некоторое сокращение времени поиска. Методы координатного спуска недостаточно эффективны для поверхностей с "оврагами", так как в этом случае получение решения с требуемой точностью не гарантировано. Это вызвано тем, что в случае "оврага", повернутого относительно осей, попытка продвижения в любом направлении может вызывать "ухудшение" целевой функции. В то же время продвижение вдоль "оврага" может давать "улучшение" целевой функции.

Метод Розенброка. Метод Розенброка направлен на устранение одного из недостатков метода покоординатного спуска – высокую чувствительность к выбору системы координат. В процессе поиска методом Розенброка производится поворот координатных осей так, чтобы одна из осей была направлена вдоль направления "оврага".

Метод поиска по симплексу. Регулярный симплекс в N-мерном пространстве – это многогранник, образованный $N+1$ равноотстоящими точками – вершинами симплекса. Его важным свойством является возможность построения нового симплекса на любой грани исходного путём переноса выбранной вершины на некоторое расстояние вдоль прямой, соединяющей эту вершину с центром тяжести остальных вершин симплекса.

Метод Хука–Дживса. Алгоритм поиска по симплексу можно усовершенствовать путём введения множества векторов, задающих направления поиска. Эти вектора должны быть линейно-независимы и образовывать базис в пространстве независимых переменных. Таким условиям удовлетворяет система координатных направлений.

2.2. Градиентные методы

Итерационные процессы оптимизации, направление поиска которых на каждом шаге совпадает с антиградиентом функции, называются градиентными методами [2].

Алгоритм наискорейшего спуска реализует итерационную процедуру движения к минимуму из произвольно выбранной начальной точки в направлении наиболее сильного уменьшения функции, определенном в окрестности текущего значения аргумента минимизируемой функции. Такое направление противоположно направлению, задаваемому вектором градиента $\nabla f(x)$ минимизируемой функции $f(x)$. Общая формула для нахождения значения аргумента $x^{(k+1)}$ по значению $x^{(k)}$, найденному на k-м шаге работы алгоритма наискорейшего спуска:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} * s^{(k)}, \tag{2}$$

где s^k – вектор единичной длины в направлении, противоположном направлению градиента $\nabla f(x^{(k)})$, определенном в точке $x^{(k)}$:

$$s^{(k)} = \frac{-\nabla f(x^{(k)})}{\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|}, \tag{3}$$

где $\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|$ – норма вектора градиента $\nabla f(x^{(k)})$, $\lambda^{(k)}$ – шаг градиентной процедуры.