

Численные методы безусловной
оптимизации. Метода
параллельных касательных (метод
Пауэлла)

Метод Пауэла

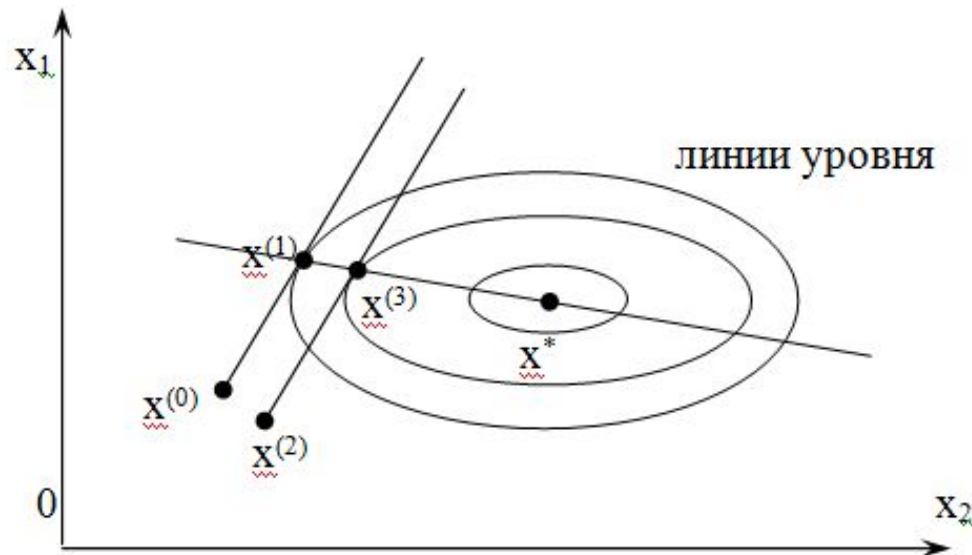
Метод ориентирован на решение задач с квадратичными целевыми функциями, т.е. функциями вида:

$$f(x) = a + b^T x + 1/2 x^T C x,$$

где $Q(x) = x^T C x$ – квадратичная форма.

Т.к. в окрестности точки оптимума любую нелинейную функцию можно аппроксимировать квадратичной функцией (поскольку линейный член разложения Тейлора обращается в нуль), то метод может быть применен и для нелинейной целевой функции общего вида.

Метод Пауэлла использует свойство квадратичной функции, заключающееся в том, что любая прямая, которая проходит через точку минимума функции x^* , пересекает под равными углами касательные к поверхностям равного уровня функции в точках пересечения.



Метод Пауэла

Суть метода заключается в следующем (Рассмотрим случай двух переменных).

Выбирается некоторая точка $x(0)$ и выполняется одномерный поиск вдоль произвольного направления, приводящий в точку $x(1)$ ($x(1)$ – точка минимума функции на выбранном направлении).

Затем выбирается точка $x(2)$, не лежащая на прямой $x(0) - x(1)$, и осуществляется одномерный поиск вдоль прямой, параллельной $x(0) - x(1)$.

Находят точку $x(3)$ – точку минимума функции на данном направлении.

Точка $x(3)$ вместе с точкой $x(1)$ определяют направление $x(1) - x(3)$ одномерного поиска, дающего точку минимума x^* .

Направления $x(0) - x(2)$ и $x(1) - x(3)$ являются сопряженными направлениями относительно матрицы C квадратичной формы $Q(x)$ (C – сопряженные направления).

Точно также сопряженными являются направления $x(2) - x(3)$ и $x(1) - x(3)$.

В рассмотренных построениях для того, чтобы определить сопряженное направление, требовалось задать две точки и некоторое направление.

Это не слишком удобно для проведения расчетов, поэтому предпочтительнее строить систему сопряженных направлений, исходя из одной начальной точки.

Это легко осуществить при помощи единичных координатных векторов $e(1), e(2), \dots, e(n)$.

$$e(1) = (1, 0, \dots, 0)^T; e(2) = (0, 1, \dots, 0)^T; \dots; e(n) = (0, 0, \dots, 1)^T.$$

Проиллюстрируем процедуру построения сопряженных направлений для случая двух переменных (ее можно обобщить и для n -мерного пространства).

Метод Пауэла

Пусть $e(1) = (1, 0)^T$; $e(2) = (0, 1)^T$.

Зададим начальную точку $x(0)$. Произведем одномерный поиск минимума функции f вдоль направления $e(n) - e(2)$ ($n=2$), начиная из начальной точки $x(0)$.

Точки прямой, исходящей из $x(0)$ в направлении $e(2)$, задаются формулой $x = x(0) + he(2)$.

Вычислим значение h_0 , которому соответствует минимум $f(x(0) + h_0e(2))$.

$f(x(0) + h_0e(2)) = \min_h f(x(0) + he(2))$.

Положим $x(0) = x(0) + h_0e(2)$.

Из точки $x(0)$ выполняем одномерный поиск вдоль направления $e(1)$.

Вычислим значение h_1 , которому соответствует минимум $f(x(0) + h_1e(1))$.

Положим $x(1) = x(0) + h_1e(1)$.

Из точки $x(1)$ выполняем одномерный поиск в направлении $e(2)$.

Вычисляем значение h_2 , которому соответствует минимум $f(x(1) + h_2e(2))$.

Положим $x(2) = x(1) + h_2e(2)$.

Направления $(x(2) - x(0))$ и $e(2)$ оказываются сопряженными.

Это видно из следующего рисунка.

Метод Пауэлла

Можно рассуждать так:

мы выбрали две точки $x^{(0)}$ и $x^{(1)}$ и из этих точек выполнили одномерный поиск в направлении $e^{(2)}$.

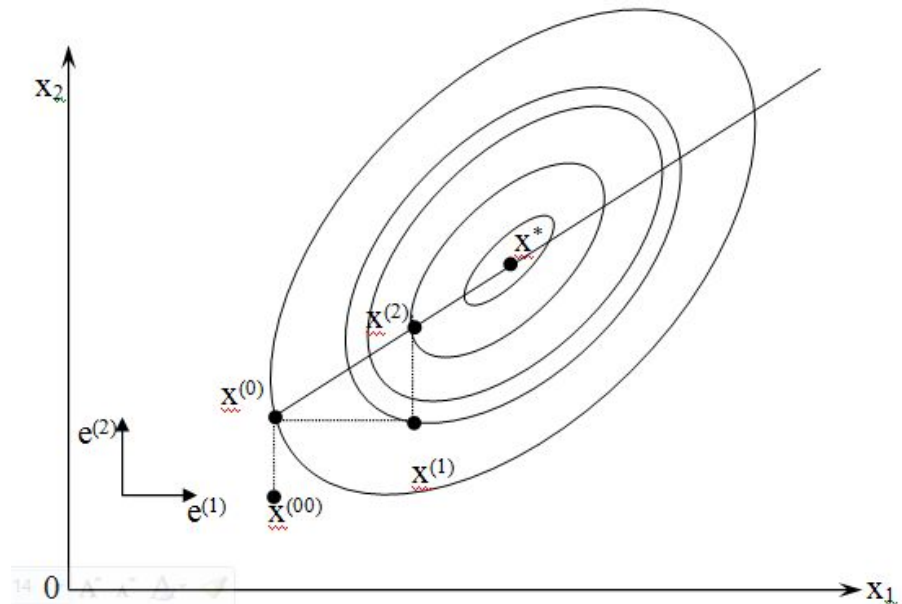
Соответствующие этим поискам точки минимума – $x^{(0)}$ и $x^{(2)}$.

Поэтому направление $x^{(0)} - x^{(2)}$ является сопряженным с направлением $e^{(2)}$.

Одномерный поиск в направлении $e^{(2)}$ дает точку минимума x^* .

Поэтому на следующей итерации проводится одномерный поиск в направлении $x^{(0)} - x^{(2)}$ и будет получена точка минимума x^* .

В случае квадратичной функции n переменных оптимальное значение находится за n итераций при этом требуется провести n^2 одномерных поисков.



Алгоритм метода Пауэлла

1. Задают начальную точку $x^{(0)}$. Выполняют одномерный поиск минимума функции f вдоль направления $p^{(n)} = e^{(n)} = (0, \dots, 0, 1)^T$. Величина шага h_0 находится из условия $f(x^{(0)} + h_0 p^{(n)}) = \min_h f(x^{(0)} + h p^{(n)})$. Полученный шаг определяет точку $x^{(1)} = x^{(0)} + h_0 p^{(n)}$; $k:=1$ (номер итерации).

2. За начальные направления поиска $p^{(1)}, p^{(2)}, \dots, p^{(n)}$ принимают направления осей координат, т.е. $p^{(i)} = e^{(i)}$ ($i = 1, \dots, n$), где $e^{(1)} = (1, 0, \dots, 0)^T$, $e^{(2)} = (0, 1, \dots, 0)^T$, \dots , $e^{(n)} = (0, \dots, 0, 1)^T$.

3. Из точки $x^{(0)}$ выполняют n одномерных поисков вдоль направлений $p^{(i)}$ ($i = 1, \dots, n$). При этом каждый следующий поиск производится из точки минимума, полученной на предыдущем шаге. Величина шага h_i находится из условия $f(x^{(i-1)} + h_i p^{(i)}) = \min_h f(x^{(i-1)} + h p^{(i)})$. Полученный шаг определяет точку $x^{(i)} = x^{(i-1)} + h_i p^{(i)}$.

4. Выбираем новое направление $p = x^{(n)} - x^{(0)}$ и заменяем направления $p^{(1)}, \dots, p^{(n)}$ соответственно на $p^{(2)}, \dots, p^{(n)}, p$.

5. Из точки $x^{(n)}$ осуществляют одномерный поиск вдоль направления $p = p^{(n)} = x^{(n)} - x^{(0)}$. Величина шага h_{n+1} находится из $f(x^{(n)} + h_{n+1} p) = \min_h f(x^{(n)} + h p)$. Полученный шаг определяет точку $x^{(n+1)} = x^{(n)} + h_{n+1} p$; $k:=k+1$ (номер итерации).

Алгоритм метода Пауэлла

6. Проверяют выполнение условия $k \leq n$. Если условие выполняется перейти к п.7, в противном случае перейти к п.8.

7. а) если целевая функция квадратичная, то поиск прекращается; x^* полагается равным $x^{(n+1)}$ ($x^* := x^{(n+1)}$).

б) если целевая функция не является квадратичной, то проверяют выполнение условия $\|x^{(n)} - x^{(0)}\| \leq \varepsilon$ (ε - заданная точность) (т.е. изменение по каждой независимой переменной должно быть меньше, чем заданная точность). Если условие выполняется, то поиск прекратить; x^* полагается равным $x^{(n+1)}$. В противном случае перейти к п.8.

8. Заменяют $x^{(0)}$ на $x^{(n+1)}$ ($x^{(0)} := x^{(n+1)}$) и принимают эту точку за начальную точку $x^{(0)}$ для следующей итерации. Переходят к п.3.

Таким образом, в результате выполнения рассмотренной процедуры осуществляется поочередная замена принятых вначале направлений поиска. В итоге после n итераций они окажутся взаимно сопряженными.

Пример

Методом Пауэлла найти точку минимума функции $f(x) = f(x_1, x_2) = 4(x_1 - 5)^2 + (x_2 - 6)^2$, если задана начальная точка $x^{(0)} = (8, 9)^T$. $f(x^{(0)}) = f(8, 9) = 45$.

Шаг 1. $x^{(0)} = \begin{bmatrix} 8 \\ 9 \end{bmatrix}$; $n=2$; направление поиска $p^{(2)} = e^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

$f(x^{(0)} + hp^{(2)}) \rightarrow \min$.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x^{(0)} + hp^{(2)} = \begin{bmatrix} 8 \\ 9 \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ h+9 \end{bmatrix}.$$

$$f(x_1, x_2) = f(8, h+9) = 4(8-5)^2 + (h+9-6)^2 = 4 \cdot 9 + (h+3)^2 = (h+3)^2 + 36 = \varphi(h).$$

$\varphi'_h = 2(h+3) = 0$, отсюда $h_0 = -3$.

Определяем точку

$$x^{(1)} = x^{(0)} + h_0 p^{(2)} = \begin{bmatrix} 8 \\ 9 \end{bmatrix} - 3 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \end{bmatrix}; k:=1 \text{ (номер итерации)}.$$

Шаг 2. $p^{(1)} = e^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$; $p^{(2)} = e^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

Пример

Шаг 3. Из точки $x^{(0)}$ выполняем одномерный поиск по направлению $p^{(1)}=(0/1)$.
Найдем такое значение h при котором $f(x^{(0)} + hp^{(1)}) \rightarrow \min$.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x^{(0)} + hp^{(1)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h+8 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

$$f(x_1, x_2) = f(h+8, 6) = 4(h+8-5)^2 + (6-6)^2 = 4(h+3)^2 = \varphi(h).$$

$$\varphi'_h = 8(h+3) = 0, \text{ отсюда } h_1 = -3.$$

Определяем точку

$$x^{(1)} = x^{(0)} + h_1 p^{(1)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

Теперь из точки $x^{(1)}$ выполняем одномерный поиск вдоль направления $p^{(2)}=(0/1)$. Найдем такое значение h , при котором $f(x^{(1)} + hp^{(2)}) \rightarrow \min$.

$$\begin{matrix} x_1 \\ x_2 \end{matrix} = x^{(1)} + hp^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ h+6 \end{pmatrix}.$$

$$f(x_1, x_2) = f(5, h+6) = 4(5-5)^2 + (h+6-6)^2 = h^2 = \varphi(h).$$

$$\varphi'_h = 2h = 0, \text{ отсюда } h_2 = 0.$$

Определяем точку

$$x^{(2)} = x^{(1)} + h_2 p^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

Пример

Шаг 4. Выбираем направление:

$$p = x^{(2)} - x^{(0)} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 8 \\ 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Заменяем:

$$p^{(1)} := p^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, p^{(2)} := p = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Шаг 5. Из точки $x^{(2)} = (5/6)$ осуществляем одномерный поиск вдоль направления $p = (-3/0)$. Найдем такое значение h , при котором $f(x^{(2)} + hp) \rightarrow \min$.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x^{(2)} + hp = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5-3h \\ 6 \end{bmatrix}.$$

$$f(x_1, x_2) = f(5-3h, 6) = 4(5-3h-5)^2 + (6-6)^2 = 36h^2 = \varphi(h).$$

$$\varphi'_h = 72h = 0, \text{ отсюда } h_3 = 0.$$

Определяем точку

$$x^{(3)} = x^{(2)} + h_3 p = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix} + 0 \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}. k := 1+1=2 \text{ (номер итерации).}$$

Шаг 6. Проверяем выполнение условия $k \geq n = 2$, условие выполняется, переходим к п. 7.

Шаг 7. а) целевая функция квадратичная, поиск закончен.

$x^* := x^{(3)} = (5/6)$ – точка минимума. $f(x^*) = f(5, 6) = 0$ – минимальное значение функции.