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

Метод Пауэла

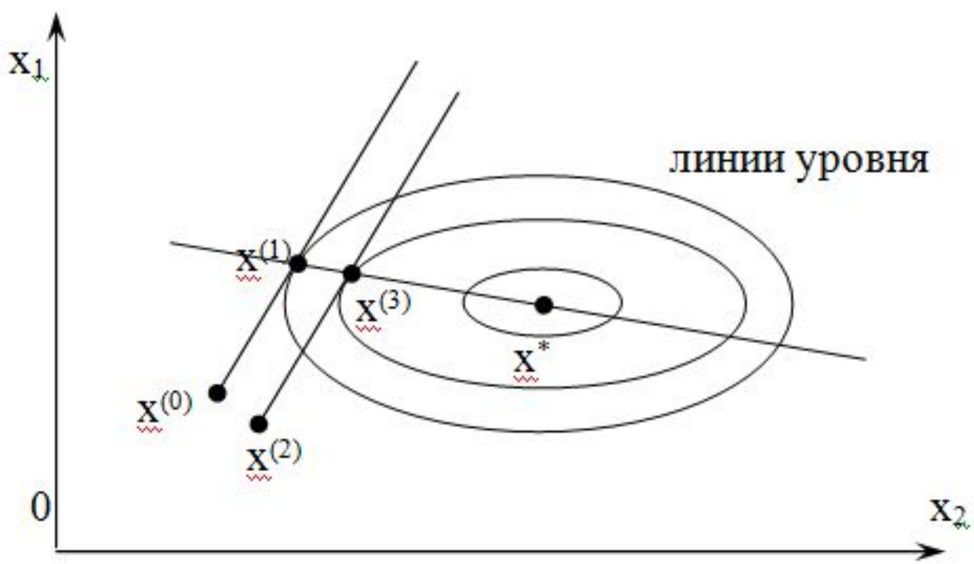
Метод ориентирован на решение задач с квадратичными целевыми функциями, т.е. функциями вида:

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

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), …, e (n).

e(1) = (1, 0, …, 0)T; e(2) = (0, 1, …, 0)T; …; e(n) = (0, 0, …, 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 $x(00)$. Произведем одномерный поиск минимума функции f вдоль направления $e(n) – e(2)$ ($n=2$), начиная из начальной точки $x(00)$.

Точки прямой, исходящей из $x(00)$ в направлении $e(2)$, задаются формулой $x = x(00) + he(2)$.

Вычислим значение $h=h0$, которому соответствует минимум $f(x(00) + h0e(2))$.

$f(x(00) + h0e(2)) = \min h\, f(x(00) + he(2))$.

Положим $x(0) = x(00) + h0e(2)$.

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

Вычислим значение $h1$, которому соответствует минимум $f(x(0)+h1e(1))$.

Положим $x(1) = x(0) + h1e(1)$.

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

Вычисляем значение $h2$, которому соответствует минимум $f(x(1)+h2e(2))$.

Положим $x(2) = x(1) + h2e(2)$.

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

Это видно из следующего рисунка.

Метод Пауэла

Можно рассуждать так:

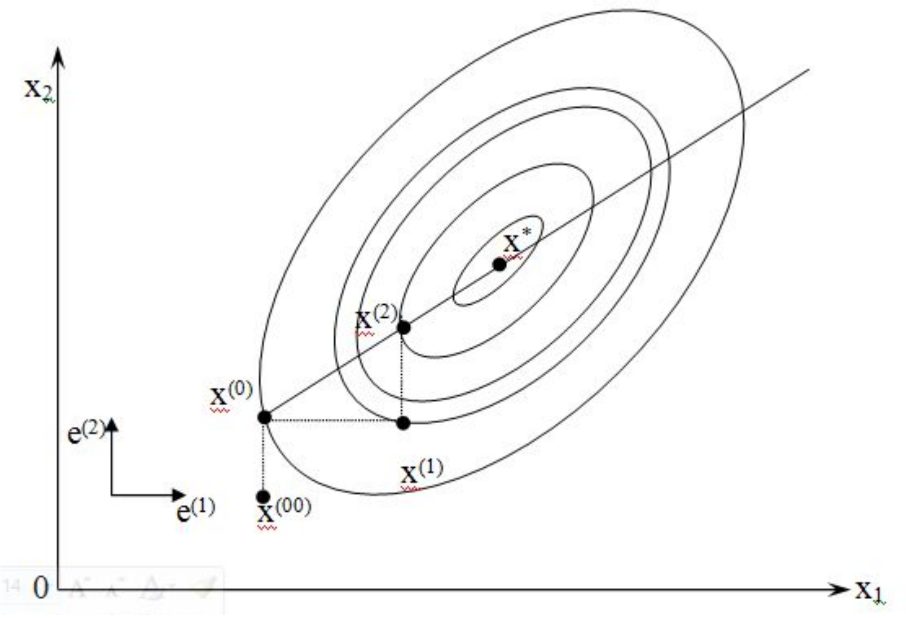
мы выбрали две точки $x^{(00)}$ и $x^{(1)}$ и из этих точек выполнили одномерный поиск в направлении $e^{(2)}$.

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 $x^{(00)}$. Выполняют одномерный поиск минимума функции f вдоль направления $p^{(n)} = e^{(n)} = (0, \ldots, 0, 1)^T$. Величина шага h_0 находится из условия $f(x^{(00)} + h_0 p^{(n)}) = \min_h f(x^{(00)} + hp^{(n)})$. Полученный шаг определяет точку $x^{(0)} = x^{(00)} + h_0 p^{(n)}$; k:=1(номер итерации).

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

3. Из точки $x^{(0)}$ выполняют n одномерных поисков вдоль направлений $p^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, n)$. При этом каждый следующий поиск производится из точки минимума, полученной на предыдущем шаге. Величина шага h_i находится из условия $f(x^{(i-1)} + h_i p^{(i)}) = \min_h f(x^{(i-1)} + hp^{(i)})$. 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 $p^{(1)}, \ldots, p^{(n)}$ соответственно на $p^{(2)}, \ldots, p^{(n)}, p$.

5. Из точки $x^{(n)}$ осуществляют одномерный поиск вдоль направления $p = p^{(n)} = x^{(n)} - x^{(0)}$. Величина шага h_{n+1} находится из $f(x^{(n)} + h_{n+1} p) = \min_h f(x^{(n)} + hp)$. 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 $x^{(00)} = (8, 9)^T$. $f(x^{(00)}) = f(8, 9) = 45$.

Шаг 1.

$$x^{(00)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \end{pmatrix}; \quad n=2; \text{ направление поиска } p^{(2)}=e^{(2)}= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$f(x^{(00)} + hp^{(2)}) \rightarrow \min$.

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x^{(00)} + hp^{(2)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ h+9 \end{pmatrix}.$$

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

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

Определяем точку

$$x^{(0)} = x^{(00)} + h_0 p^{(2)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix}; \ k:=1 \text{ (номер итерации)}.$$

Шаг 2.

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

Пример

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

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

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

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

Определяем точку

$$x^{(1)} = x^{(0)} + h_1p^{(1)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

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

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

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

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

Определяем точку

$$x^{(2)} = x^{(1)} + h_2p^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

Пример

Шаг 4. Выбираем направление:

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

Заменяем:

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

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

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

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

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

Определяем точку

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