УДК 519.8

О. О. Юдін, аспірант

ПОШУК МІНІМУМУ ФУНКЦІЙ, ЯКІ МАЮТЬ РОЗРИВИ ЧАСТИННИХ ПОХІДНИХ

Проаналізовано можливі варіанти вирішення задачі пошуку мінімуму функції, що має розрив частинної похідної, розроблено та обґрунтовано метод оптимізації першого порядку для вирішення поставленої задачі.

Ключові слова: *методи оптимізації, екстремум функції, мінімум функції, градієнт, найскоріший спуск, правило Арміхо, спряжені градієнти, розрив похідної.*

Актуальність

Сучасні методи оптимізації здатні вирішувати велику кількість задач, які можна звести до знаходження екстремуму певної цільової функції. Серед основних задач можна виділити такі: безпосередньо знаходження мінімуму (максимуму) певної функції критерію, вирішення систем лінійних рівнянь з великою кількістю невідомих, вирішення задач апроксимації. При вирішенні більш складних математичних задач існує потреба розширити область застосування методів оптимізації на різні види цільових функцій, пошук екстремуму яких неможливо проводити за допомогою існуючих методів. Суть чисельних методів оптимізації в поступовому наближенні до екстремуму цільової функції з кожним наступним кроком (ітерацією), починаючи з певного початкового наближення (або інтервалу пошуку).

Існує багато різних методів оптимізації та їх модифікацій. Усі методи можна розділити на три групи:

- методи нульового порядку (дихотомії, золотого перетину, Фібоначчі, та ін.);
- методи першого порядку (метод градієнтного спуску, найшвидшого градієнтного спуску, спряжених градієнтів);
- методи другого порядку (метод Ньютона).

Відповідно до порядку методу використовуються значення цільової функції, перші частинні похідні (градієнт функції) та другі частинні похідні (гессіан функції). Модифікації цих методів дозволяють зменшити кількість ітерацій (або звести її до скінченої кількості для певних видів цільових функцій) для знаходження екстремуму цільової функції.

Метою цього **дослідження** є розширення області застосування методів оптимізації для пошуку мінімуму функцій, які мають розриви частинних похідних.

Задачею дослідження є розробка методу першого порядку, який дозволить оптимізувати функції, що мають розриви частинних похідних першого роду, що проходять через точку мінімуму.

Спробуємо застосувати відомі методи для розв'язку поставленої задачі. Методи нульового порядку не застосовуються на практиці для вирішення багатовимірних задач через малий коефіцієнт збіжності відносно методів вищих порядків.

Серед методів першого порядку слід звернути увагу на метод найшвидшого спуску. Цей метод полягає в послідовності обрахунку антиградієнта функції на певному кроці та лінійному пошуку в цьому напрямі. Повторення ітерації здійснюється до досягнення певної заданої точності [1, 2]. Якщо функція має криволінійну (або прямолінійну) лінію розриву першої частинної похідної, що проходить через локальний мінімум, то цей метод збігається до першого перетину з лінією розриву. У результаті дослідження було встановлено, що ефективність цього методу для вирішення даної задачі можна підвищити, використовуючи нечіткий лінійний спуск, а саме – правило Арміхо (Armijo rule) [3]. Це можна пояснити тим, що дане правило дозволяє швидко, але не точно, обчислювати мінімум на стадії лінійного пошуку, цим самим дає можливість уточнення градієнту до досягнення розриву. Правило

Арміхо та принцип його роботи зображено на рисунку 1. Але для функцій такого роду з великим числом аргументів, цей підхід теж не є достатньо ефективним: часто має ті ж недоліки, що й підхід з використанням точного лінійного пошуку. Також цей метод – досить повільний і потребує великої кількості ітерацій, особливо для вирішення багатовимірних задач.

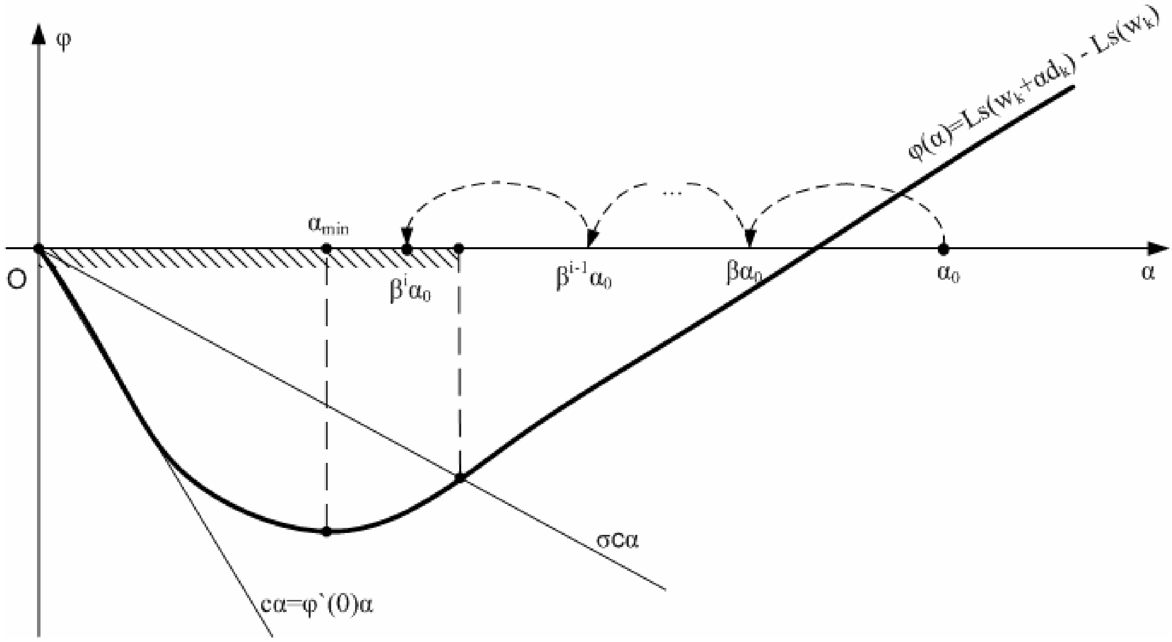

Рис. 1. Правило Арміхо

Ще один метод першого порядку, який знайшов широке застосування, – метод спряжених градієнтів. Однією з його переваг є те, що він має малу та кінцеву кількість ітерацій для пошуку мінімуму квадратичних функцій з додатньо-визначеною матрицею лінійного перетворення. Даний метод має дві модифікації згідно з алгоритмами обчислення спряженого напрямку: метод Флетчера–Рівса та Полака–Ріб'єра [1, 4]. При застосуванні цього методу до вирішення задачі з розривом першої частинної похідної виявилось, що алгоритм починає розбігатися після досягнення лінії розриву через неправильне обчислення на ній спряженого напрямку.

Серед методів другого порядку метод Ньютона має додаткові обмеження на вигляд функції і потребує обчислення матриці Гессе, що не завжди є можливим та доцільним з точки зору швидкодії [1].

Математична модель

Виходячи з аналізу та досліджень існуючих методів, їх область застосування не поширюється на функції, що мають розриви частинних похідних першого роду.

Дослідження існуючих методів засвідчило такі основні проблеми: розбіжність і зупинка алгоритмів, стаються на межі розриву частинної похідної. Отже, якщо точка мінімуму знаходиться на цій межі, то при її досягненні подальший рух потрібно здійснювати вздовж межі. Напрям такого руху можна задати як інтерполяцію декількох точок, що знаходяться на межі. Обчислення цих точок можна зробити за допомогою методу найшвидшого градієнтного спуску.

Виходячи з цього, в розробленому методі пропонується вибрати три початкові наближення та в подальших ітераціях звужувати отриманий трикутник у напрямі мінімуму функції. Вибір точок здійснюється поблизу локального мінімуму функції таким чином, щоб лінії градієнтів будь-яких двох точок не накладалися.

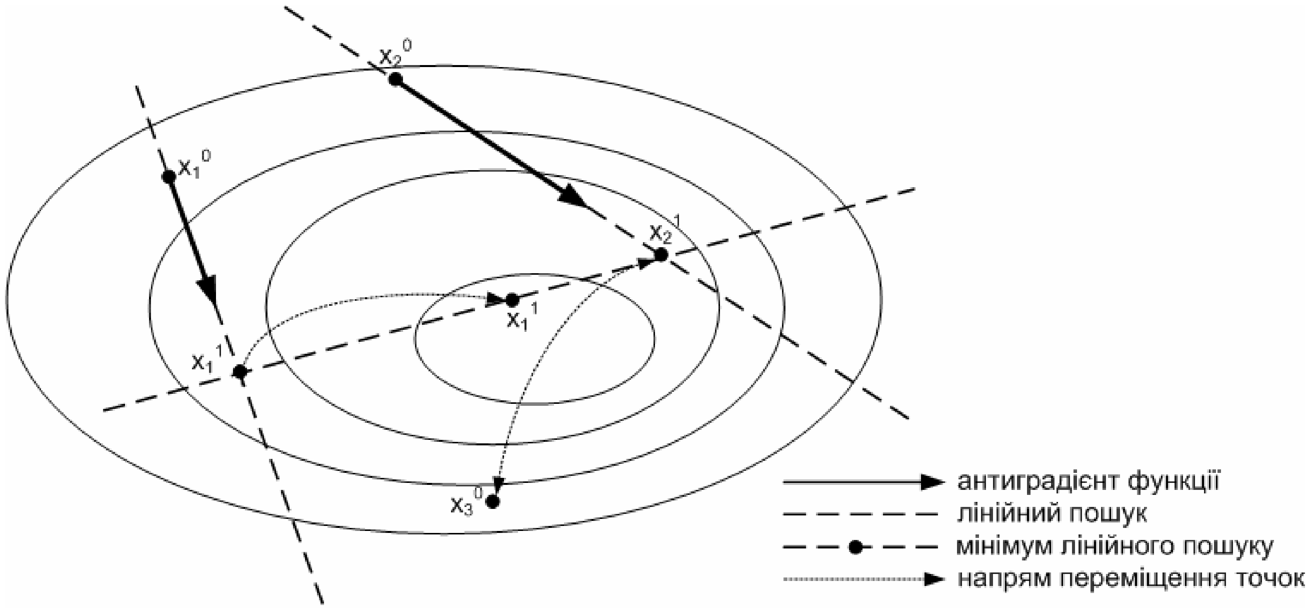

Рис. 2. Перший крок методу

Після вибору трьох наближень з них обираються дві точки x_1 та x_2 та проводиться лінійний пошук у напрямі антиградієнтів функції в цих точках:

$$d_i^k = -\nabla f(x_i^k), \tag{1}$$

де f – функція, мінімум якої потрібно знайти; d_i^k – напрям лінійного пошуку; x_i^k – $к$-те наближення i-ої початкової точки.

Лінійний пошук можна проводити, використовуючи метод Ньютона для функції однієї змінної (2).

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

Метод Ньютона для одновимірної задачі базується на апроксимації функції параболою в точці наближення і переміщенні аргументу в точку мінімуму параболи. Апроксимація виконується за допомогою розкладу функції в степеневий ряд Тейлора, коефіцієнтами якого є перша та друга похідна функції в початковій точці. Похідні функції у вибраному напрямі знаходять чисельно, використовуючи різницеві формули. Через те, що метод Ньютона застосовується для знаходження мінімуму функції з неперервною частинною похідною, треба накласти відповідні умови для його застосування при вирішенні задачі [1]. Такою умовою є те, що різницевий крок методу не повинен перевищувати задану точність методу. Ця умова забезпечує коректний різницевий обрахунок першої та другої похідної для точки, що знаходиться біля лінії розриву похідної функції.

Нове наближення знаходиться за формулою (3).

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \alpha_i^k \cdot d_i^k. \tag{3}$$

Після знаходження наступних наближень для вибраних точок проводиться лінійний пошук у напрямі d^k по лінії ($x_1^k\ x_2^k$) з початковим наближенням x^k яке відповідає меншому з двох значенню функції:

$$\begin{aligned} d^k &= x_2^k - x_1^k, \\ x^k &= \arg\min_x (f(x_2^k), f(x_1^k)). \end{aligned} \tag{4}$$

Отриманий у результаті лінійного пошуку мінімум замінює наближення x_1^k або x_2^k в залежності від того, значення функції в якому найбільше, а інше наближення міняється місцями з тим, що залишилося, – x_3. Процес першої ітерації зображено на рисунку 2.

Розроблений метод можна також застосовувати для вирішення задач пошуку мінімуму звичайних неперервних багатовимірних функцій. Він потребує досить невеликої кількості ітерацій і має таку саму скінчену збіжність для квадратичних функцій, як і метод спряжених градієнтів. Загальний алгоритм методу зображено на рисунку 3.

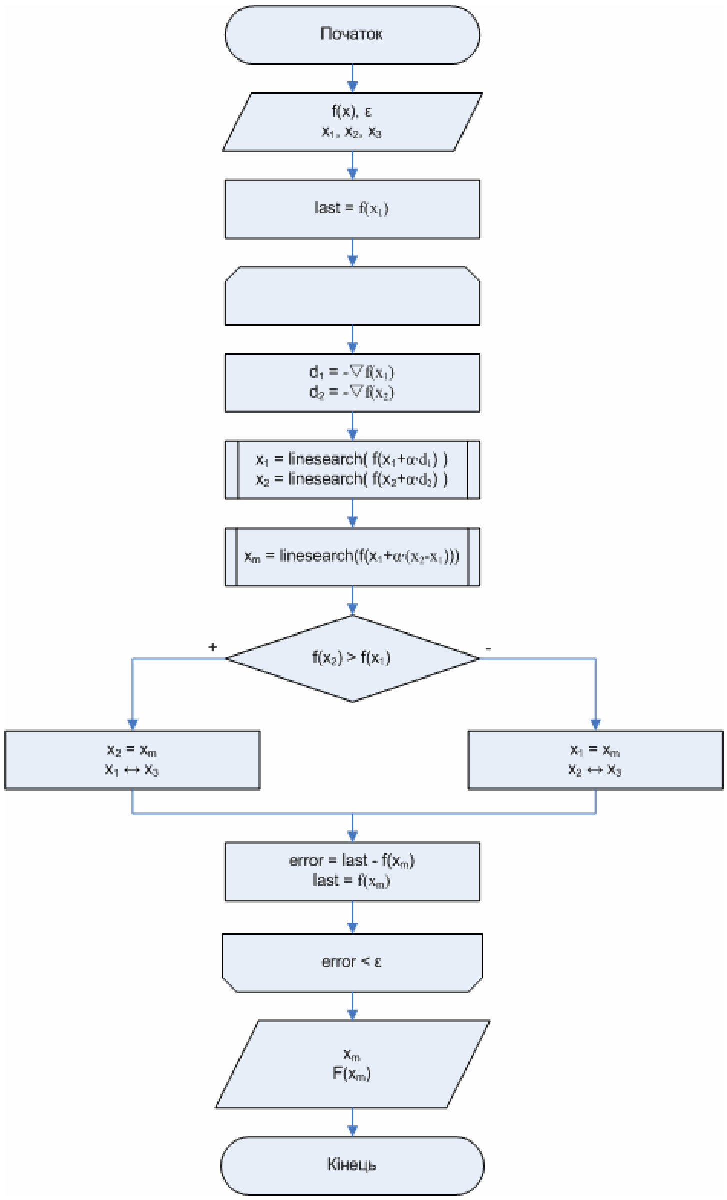

Рис. 3. Алгоритм роботи методу оптимізації

Висновки

У результаті дослідження було розроблено метод оптимізації першого порядку, який дозволяє знаходити мінімум функцій, що мають розриви першої частинної похідної першого роду. Також на основі методу було створено алгоритм та відповідне програмне забезпечення у вигляді набору функцій математичного пакету прикладних програм MATLAB.

Розроблений алгоритм є загальним і може бути застосований для пошуку мінімуму функцій з неперервними частинними похідними. Цей метод можна застосовувати в задачах багатовимірної інтерполяції та апроксимації, розв'язок яких будується за критерієм найменшого квадрату.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

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. C. T. Kelley. Iterative Methods for Optimization. – SIAM: Philadelphia, 1999. – P.40-43
4. Метод сопряженных градиентов – математический аппарат [Електронний ресурс] / Н. Некипелов. – Режим доступу.: http://www.basegroup.ru/library/analysis/neural/conjugate/ (01 июля 2008).

Юдін Олег Олександрович – аспірант кафедри автоматики та інформаційно-вимірювальної техніки, yudin_oleh@ukr.net.

Вінницький національний технічний університет.