

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ СХЕМ ГРАДИЕНТНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

*Лосников Г.Г., Тобокелов М.К., Эсенбеков А.Э.
научн.рук. проф. Миркин Е.Г.
КГТУ им. И.Раззакова*

В данной работе проводится обзор нескольких разновидностей градиентных схем оптимизации и даются рекомендации по их использованию в конкретных практических случаях. Приводятся примеры компьютерного моделирования градиентных схем оптимизации в пакете Matlab на тестовых целевых функциях.

Градиентный метод с фиксированным шагом

Пусть x_i определяет производную точку на множестве аргументов функции $f(x)$, тогда для достаточно малых $\|\delta x_i\| \ll 1$ функцию $f(x)$ можно разложить в ряд Тейлора и удержать два члена разложения:

$$f(x_i + \delta x) \approx f(x_i) + \nabla f^T(x_i) \delta x_i$$

Очевидно, что для заданной длины минимум разности

$$f(x_i - \delta x_i) - f(x_i) = \nabla f^T(x_i) \delta x_i$$

будет достигаться для вектора δx_i сонаправленного вектору $\nabla f(x_i)$. Отсюда следует, что

$$\delta x_i = \alpha * k * \nabla f(x_i) \quad (1)$$

где α – индикатор знака (+1 или -1), k – положительная величина $k > 0$.

С учетом (1) разница между соседними точками

$$f(x_i - \delta x_i) - f(x_i) = \alpha * k * \nabla f^T(x_i) * \nabla f(x_i) = \alpha * k$$

Таким образом, итеративный алгоритм принимает след вид

$$x_{i+1} = x_i + \delta x_i \Rightarrow x_{i+1} = x_i - k * \nabla f(x_i)$$

Для иллюстрации данного метода выберем целевую функцию в виде $f(x)=\cos(x_1^2)+\sin(x_2^2)$, найдём минимум данной

функции по переменной x_1, x_2 . Приведём графическую интерпретацию данного метода в 3D и 2D вариантах.

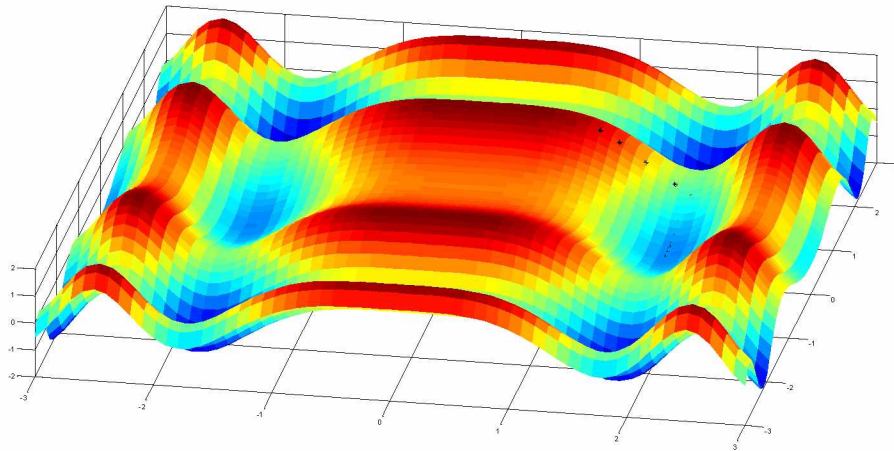


Рис.1: Траектория спуска (3D интерпретация)

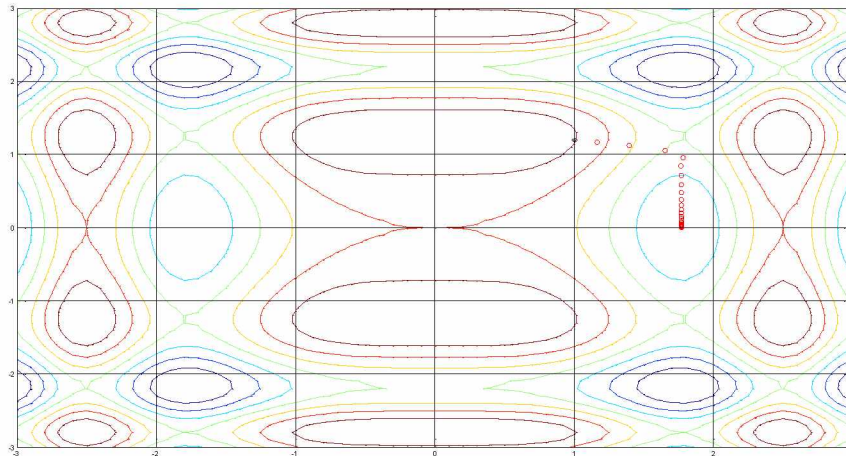


Рис.2: Траектория спуска(2D интерпретация)

Как видно из рис. 1,2 данный метод находит точку минимума за 29итерации, и траектория спуска соответствует градиентному методу с фиксированным шагом.

Градиентный метод с оптимизацией шага

Очевидно, что для уменьшения количества итераций градиентного метода можно на каждой итерации оптимизировать шаг. Суть данного метода заключается в том, что на каждой итерации спуска шаг оптимизируется таким образом, чтобы вдоль направления спуска минимизировать целевую функцию.

Математически градиентный метод оптимизации можно представить в следующем виде:

$$x_{i+1} = x_i - k_i \nabla f(x_i),$$

где величина шага k_i определяется из решения одномерной оптимизационной задачи:

$$\min_{k_i} f(x_i - k_i \nabla f(x_i))$$

Указанную выше одномерную задачу можно решить, например, с помощью метода дихотомий. Приведём графическую интерпретацию данного метода для той же целевой функции $f(x)=\cos(x_1^2)+\sin(x_2^2)$ (рис. 2) в 2D варианте.

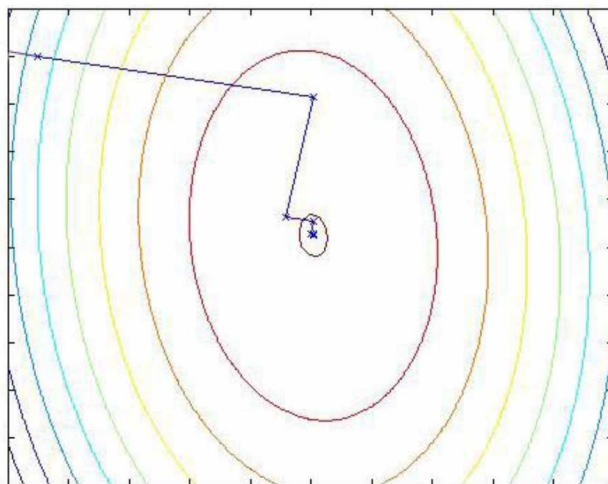


Рис.3: Траектория спуска (2D интерпретация)

Для более наглядной иллюстрации на рис.3 взят фрагмент области графика целевой функции вблизи точки минимума. Видно, что данный метод находит минимум за 9 итераций, следовательно, он является более эффективным по сравнению со стандартным градиентным методом.

Градиентный метод с эвристическим выбором шага

В данном методе предполагается изменять шаг по следующему алгоритму: если текущая точка находится «далеко» от минимума, то шаг следует увеличивать, а если «близко» – уменьшить. Для выбора шага k предполагается установить некий критерий, основанный на использовании угла α между последними векторами шагов в процессе минимизации. Например, если угол α

между соседними направлениями векторов спуска – «маленький», то направление спуска можно считать неизменяющимся и шаг следует «увеличивать». Если же угол α – «большой», то шаг следует «уменьшить».

Угол α в предложенном алгоритме можно определить с помощью известного соотношения:

$$x_i^T * x_{i+1} = \|x_i\| * \|x_{i+1}\| * \cos(\alpha),$$

$$\alpha = \arccos\left(\frac{x_i^T * x_{i+1}}{\|x_i\| * \|x_{i+1}\|}\right).$$

Процедура изменения шага может быть определена различным образом в зависимости от вида рельефа целевой функции. Приведём графическую интерпретацию данного метода для той же целевой функции $f(x) = \cos(x_1^2) + \sin(x_2^2)$ (рис. 2) в 2D и 3D вариантах.

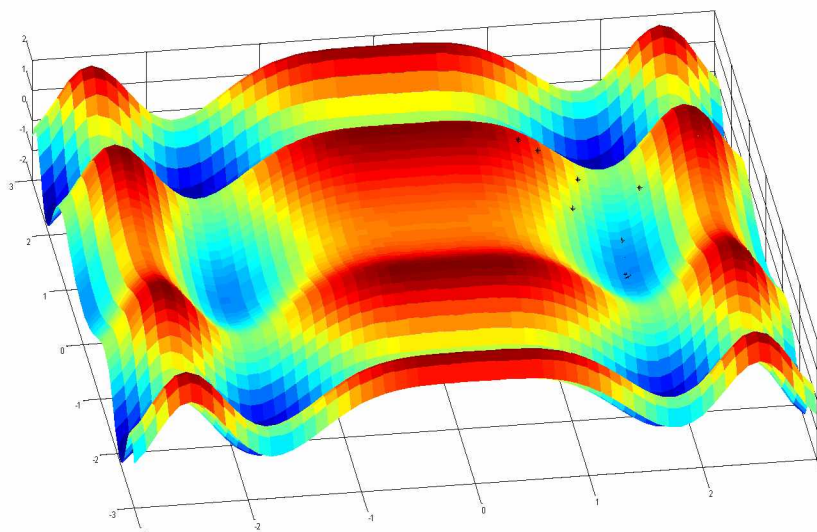


Рис.4: Траектория спуска (3D интерпретация)

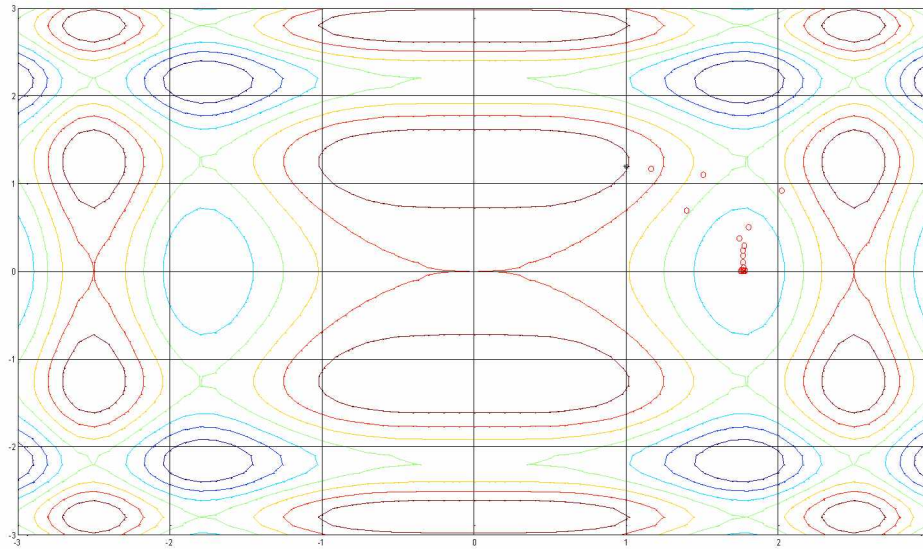


Рис.5: Траектория спуска (2D интерпретация)

Из рис.5 видно, что траектория спуска имеет зигзагообразную форму. Процесс сходится за 18 итераций. Таким образом данный алгоритм более эффективен чем стандартный.

Сравнение градиентных методов оптимизации

Главная проблема градиентных методов заключается в выборе величины шага k итерационных процедур $x_{i+1} = x_i - k \nabla f(x_i)$. Если шаг очень маленький, то необходимо делать много итераций для достижения цели, тем самым замедляя процесс поиска минимума. В случае выбора большого шага возможна ситуация ввода алгоритма в «режим релаксации» т.е. в режим автоколебаний. Существует несколько разновидностей градиентных методов помогающих рационально вести себя с выбором шага:

1. Градиентный метод с оптимизацией шага.
2. Градиентный метод с эвристическим методом выбора шага.

В условиях расположения начальной точки старта итерационной процедуры на удалённом расстоянии от минимума, методы с эвристическим выбором шага, при правильной настройке, могут быть гораздо более эффективны в вычислительном плане, нежели остальные. Относительно малая точность градиентных методов, вероятнее всего,

обусловлена численным, не очень точным, вычислением самого градиента. Такие проблемы в частности могут возникнуть вблизи точки минимума.

Вывод.

Универсальных рекомендации по выбору градиентного метода для решения различных задач минимизации не существует. Каждый метод, с одной и той же целевой функцией, может вести себя различным образом. Поэтому при выборе метода оптимизации, имеет смысл устраивать их конкуренцию (соревнование) на тестовой целевой функции, для выявления лучшего метода, удовлетворяющего всем условиям решаемой задачи.

Литература

1. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. «Оптимизация в технике» 1986г.
2. Сушков Ю.А. «Об одном способе организации случайного поиска. Автоматика и вычислительная техника» 1974г.
3. Растринин Л.А. «Статистические методы поиска» 1968г.
4. Жилинская А.Г. «Методы поиска глобального экстремума» 1991г.