

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ОДНОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИЙ НЕСКОЛЬКИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Методические указания
к выполнению лабораторной работы
по дисциплине «Прикладная математика и информатика»
для студентов направления
09.03.01 «Информатика и вычислительная техника»
очной формы обучения

Севастополь
СевГУ
2022

УДК 519.651 (076.5)

ББК 22.193я73

Ч-660

Р е ц е н з е н т :

М.В. Замоленов - канд. техн. наук, доцент
кафедры информационных технологий и компьютерных систем

Составители : И.А. Балакирева, А.В. Скатков

Ч-660 Численные методы однокритериальной оптимизации функций нескольких переменных : методические указания к выполнению лабораторной работы по дисциплине «Прикладная математика и информатика» для студентов направления 09.03.01 «Информатика и вычислительная техника» очной формы обучения / Севастопольский государственный университет; сост. : И.А. Балакирева, А.В. Скатков. – 2022. – 39 с. – Текст : электронный.

Целью методических указаний является оказание помощи студентам в изучении теории оптимизации и выполнении лабораторных работ по дисциплине «Прикладная математика и информатика» и раздела выпускной квалификационной работы бакалавра, связанного с определением эффективности функционирования сложных систем.

УДК 519.651 (076.5)

ББК 22.193я73

Методические указания рассмотрены и утверждены на заседании кафедры информационных технологий и компьютерных систем, протокол № 7 от 31 мая 2022 г.

© ФГАОУВО «Севастопольский
государственный университет», 2022

СОДЕРЖАНИЕ

1. Общая постановка задачи оптимизации	4
1.1. Основные положения	4
1.2. Необходимые и достаточные условия для задачи безусловной оптимизации.	7
1.3. Критерий проверки достаточных условий существования экстремума (критерий Сильвестра)	8
2. Принципы построения численных методов поиска безусловного экстремума	8
3. Методы нулевого порядка	10
3.1. Метод Хука - Дживса (метод конфигураций)	10
3.2. Метод поиска по симплексу	14
4. Методы первого порядка (градиентные методы)	19
4.1. Метод Коши (метод наискорейшего спуска)	20
4.2. Методы сопряженных направлений	23
4.3. Метод Флетчера - Ривса	24
4.4. Метод Дэвидона - Флетчера - Пауэлла	29
5 Методы второго порядка. Метод Ньютона	33
6. Индивидуальные задания к разделу «Численные методы многопараметрической оптимизации»	36
7. Порядок выполнения задания	36
8. Содержание отчета о выполнении индивидуального задания	37
Библиографический список	38
Приложение А	39

1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ.

1.1. Основные положения

Постановка задачи поиска минимума функции содержит [1-5]:

- целевую функцию $f(X)$, где $X=(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, определенную на n -мерном евклидовом пространстве $\mathfrak{R}^n$. Ее значения характеризуют степень достижения цели, во имя которой поставлена или решается задача;

- множество допустимых решений $D \subseteq \mathfrak{R}^n$, среди элементов которого осуществляется поиск.

Требуется найти такой вектор X^* из множества допустимых решений, которому соответствует минимальное значение целевой функции на этом множестве:

$$f(X^*) = \min_{X \in D} f(X) \quad (1.1)$$

Замечания.

1. Задача (1.1) поиска максимума функции $f(X)$ сводится к задаче поиска минимума путем замены знака перед функцией на противоположный:

$$f(X^*) = \max_{X \in D} f(X) = \min_{X \in D} [-f(X)].$$

2. Если множество допустимых решений X задается ограничениями (условиями), накладываемыми на вектор X , то решается задача поиска *условного* экстремума. Если $D = \mathfrak{R}^n$, то есть ограничения (условия) отсутствуют, решается задача поиска *безусловного* экстремума.

3. Решением задачи поиска экстремума является пара $(X^*, f(X^*))$, включающая точку X^* и значение целевой функции в ней.

4. Решение задачи поиска экстремума может содержать конечное число точек (в том числе одну), бесконечное число точек или быть пустым.

Определение 1. Точка $X^* \in D$ называется точкой глобального минимума функции $f(X)$ на множестве D , если функция достигает в этой точке своего наименьшего значения, то есть $f(X^*) \leq f(X)$ для всех $X \in D$.

Определение 2. Точка $X^* \in D$ называется точкой глобального минимума функции $f(X)$ на множестве D , если существует $\varepsilon > 0$, такое, что, если $X \in D$ и $\|X - X^*\| < \varepsilon$, то $f(X^*) \leq f(X)$. Здесь $\|X\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ — евклидова норма вектора X .

Замечание. В определении 1 точка X^* сравнивается со всеми точками из множества допустимых решений D , а в определении 2 — только с принадлежащими ε -окрестности (см. рисунок 1).

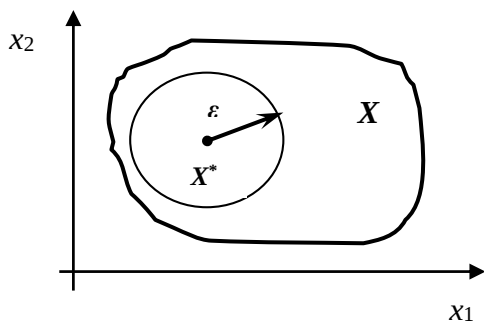


Рисунок 1 — Характер экстремума функции относительно рассматриваемой области

Определение 3. Поверхностью уровня функции $f(X)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянное значение, то есть, $f(X)=\text{const}$. Если $n=2$, поверхность уровня изображается линией уровня на плоскости $\mathbb{R}^2$.

Пример 1. Построить линии равного уровня функций:

а) $f(X) = x_1^2 + x_2^2$; б) $f(X) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2$.

Решение. Уравнения линий уровня имеют следующий вид:

а) $f(X) = x_1^2 + x_2^2 = \text{const} = r^2$ — уравнение окружностей с центром в точке $(0, 0)^T$ и радиусом, равным r .

б) $f(X) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2 = \text{const}$ — уравнение эллипса. Если $\text{const}=1$, то $a=1$,

$b=1$ — большая и малая полуоси.

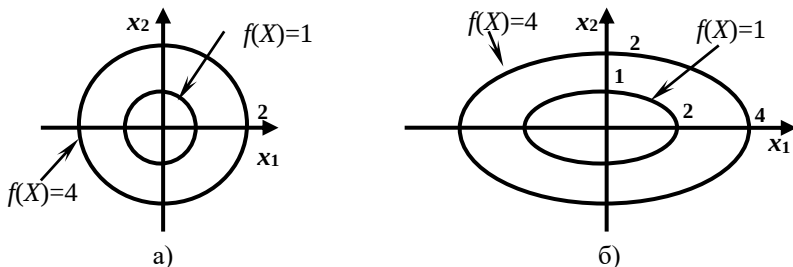


Рисунок 2 — Линии равного уровня функции.

Определение 4. Если функция $f(X)$ непрерывна и дифференцируема на множестве D , то существует градиент $f(X)$, определяемый как вектор-столбец из первых частных производных $f(X)$ по X , значения которого берутся в данной точке $X^{(k)}$:

$$\nabla f(X^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(X^{(k)})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(X^{(k)})}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Градиент направлен по нормали к поверхности уровня, то есть перпендикулярно к касательной плоскости, проведенной в точке $X^{(k)}$, в направлении наибольшего увеличения функции в этой точке.

Определение 5. Если $f(X)$ дважды дифференцируема на D , то квадратная матрица вторых частных производных $f(X)$, вычисленная в данной точке $X^{(k)}$, называется матрицей Гессе, или **гессианом**:

$$\nabla^2 f(X^{(k)}) = H(X^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dots & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_i \partial x_j} & \dots \\ \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

Замечания.

1. Одновременно с градиентом можно определить вектор антиградиента, равный по модулю вектору градиента и противоположный ему по знаку. Антиградиент имеет направление наибольшего убывания функции в данной точке.

2. С помощью градиента и матрицы Гессе можно представить приращение $f(X)$ в данной точке на основе разложения функции в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \Delta f(X) &= f(X + \Delta X) - f(X) = \\ &= \nabla f(X)^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T H(X) \Delta X + O_3(\Delta X), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где $O_3(\Delta X)$ — сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго.

1.2. Необходимые и достаточные условия для задачи безусловной оптимизации.

Дана непрерывная и дважды дифференцируемая функция $f(X)$, определенная на множестве $X \in D \subseteq \mathbb{R}^n$.

Требуется исследовать функцию $f(X)$ на наличие экстремумов и определить их характер.

Стратегия решения задачи:

1. Находятся точки X^* локальных экстремумов с помощью необходимых условий первого и второго порядков (порядок условий определяется порядком используемых производных).

2. Определяется характер экстремума с помощью достаточных условий существования безусловного локального экстремума.

3. Вычисляется значение функции $f(X^*)$ в точках локальных экстремумов.

Утверждение 1. Необходимые условия существования экстремума первого порядка.

Для существования локального экстремума $f(X)$ в точке X^* необходимо:

1. $f(X)$ должна быть дифференцируема в точке X^* ;
2. Градиент функции в этой точке должен быть равен нулю:

$$\nabla f(X^*) = 0. \quad (1.3)$$

Точки, удовлетворяющие условию и (1.3) называются **стационарными**.

Утверждение 2. Необходимые условия существования экстремума второго порядка.

Пусть точка X^* есть точка локального минимума (максимума) функции $f(X)$ на множестве $\mathbb{R}^n$ и функция $f(X)$ дважды дифференцируема в этой точке. Тогда матрица Гессе $H(X^*)$, вычисленная в этой же точке является положительно полуопределенной (отрицательно полуопределенной), то есть

$$\begin{aligned} H(X^*) &\geq 0, \\ H(X^*) &\leq 0 \end{aligned} \quad (1.4)$$

Утверждение 3. Достаточные условия существования экстремума.

Для существования локального минимума (максимума) $f(X)$ в точке X^* необходимо и достаточно, чтобы выполнялись

1. Условие (1.3);
2. Условие (1.4);
3. Матрица Гессе должна быть положительно определена:

$\nabla^2 f(X^*) = H(X^*) > 0$, тогда точка X^* есть точка минимума функции $f(X)$, или отрицательно определена:

$\nabla^2 f(X^*) = H(X^*) < 0$, тогда точка X^* есть точка максимума функции $f(X)$.

1.3. Критерий проверки достаточных условий существования экстремума (критерий Сильвестра).

1. Для того, чтобы матрица Гессе $H(X^*)$ была положительно определена ($H(X^*) > 0$), и точка X^* являлась точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки угловых миноров $H(X^*)$ были строго положительны: $\Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \dots, \Delta_n > 0$.

2. Для того, чтобы матрица Гессе $H(X^*)$ была отрицательно определена ($H(X^*) < 0$), и точка X^* являлась точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки угловых миноров $H(X^*)$ чередовались, начиная с отрицательного: $\Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \Delta_3 < 0, \dots, (-1)^n \Delta_n > 0$.

Пример 2. Определить координаты точки экстремума функции $f(X) = x_1^2 + x_2^2$

1. Проверка необходимых условий существования экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 = 0; \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = 2x_2 = 0;$$

В результате решения системы получим стационарную точку $X^* = (0, 0)^T$.

2. Проверка достаточных условий существования экстремума:

Матрица Гессе имеет вид $H(X^*) = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix}$.

Вычислим угловые миноры матрицы Гессе $\Delta_1 = |2| > 0, \Delta_2 = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 4 > 0$.

Так как угловые миноры матрицы Гессе положительны, точка X^* является локальным минимумом.

2. ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Применение необходимых и достаточных условий существования экстремума функции (1.3) и (1.4) эффективно для решения ограниченного числа задач, в которых вытекающие из условий соотношения имеют аналитическое решение. Для решения большинства практических задач оптимизации эти условия не могут быть рекомендованы по следующим причинам [1-5]:

1. Целевая функция $f(X)$ может не иметь непрерывных производных до второго порядка включительно.

2. Использование необходимого условия первого порядка (1.3) связано с решением системы n в общем случае нелинейных уравнений, что представляет собой самостоятельную задачу, и, трудоемкость решения которой сравнима с трудоемкостью численного решения поиска экстремума.

3. Возможны случаи, когда о целевой функции известно лишь то, что ее значение может быть вычислено с нужной точностью, а сама функция задана неявно.

Подавляющее большинство численных методов оптимизации относится к классу итерационных, то есть порождающих последовательность точек в соответствии с предписанным набором правил, включающих критерий окончания вычислений. При заданной начальной точке X^0 методы генерируют последовательность $X^0, X^1, X^2, \dots$. Преобразование точки X^k в X^{k+1} представляет собой одну итерацию.

Для определенности рассмотрим задачу поиска безусловного локального минимума

$$f(X^*) = \min_{X \in \mathcal{R}^n} f(X). \quad (2.1)$$

Численное решение задачи (5), как правило связано с построением последовательности $\{X^k\}$ точек, обладающих свойством

$$f(X^{k+1}) < f(X^k), k=0, 1, \quad (2.2)$$

Общее правило построения последовательности $\{X^k\}$ имеет вид

$$X^{k+1} = X^k + \alpha^k s^k, k=0, 1, \quad (2.3)$$

где X^0 — начальная точка поиска; s^k —приемлемое направление перехода из точки X^k в точку X^{k+1} , обеспечивающее выполнение условия (2.2) и называемое направлением спуска; α^k — величина шага вдоль направления s^k .

Начальная точка X^0 задается, исходя из физического содержания решаемой задачи и наличия априорной информации о положении точек экстремума.

Приемлемое направление спуска s^k должно удовлетворять условию $(\nabla f(X^k), s^k) < 0$, обеспечивающему убывание функции $f(X)$.

Величина шага $\alpha^k > 0$ выбирается либо из условия (2.2), либо из условия минимума функции вдоль направления спуска:

$$f(X^k + \alpha^k s^k) \rightarrow \min_{s^k}. \quad (2.4)$$

Выбор шага α^k из условия (2.4) делает спуск в направлении s^k наискорейшим.

Определение 6. Последовательность $\{X^k\}$ называется минимизирующей, если $\lim_{k \rightarrow \infty} f(X^k) = f^*$, то есть последовательность сходится к нижней грани

$$f^* = \inf_{X \in \mathbb{R}^n} f(X^k).$$

Определение 7. Последовательность $\{X^k\}$ называется сходящейся к точке минимума X^* , если $\|X^k - X^*\| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Сходимость последовательности $\{X^k\}$ при выборе приемлемого направления S^k и величины шага α^k из условий (2.2) или (2.4) зависит от характера функции $f(X)$ и от выбора начальной точки X^0 .

В зависимости от наивысшего порядка производных функции $f(X)$, используемых для формирования S^k и α^k , численные методы решения задачи безусловной оптимизации (1.1) принято делить на три группы.

1. Методы нулевого порядка (прямого поиска), использующие только информацию о значении функции $f(X)$.

2. Методы первого порядка (градиентные методы), использующие информацию о первых производных функции $f(X)$.

3. Методы второго порядка (Ньютоновские методы), требующие для своей реализации знания вторых производных функции $f(X)$.

3. МЕТОДЫ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА

3.1. Метод Хука - Дживса (метод конфигураций)

Требуется найти безусловный минимум функции, то есть найти такую точку

$$X^* \in \mathbb{R}^n, \text{ что } f(X^*) = \min_{X \in \mathbb{R}^n} f(X).$$

Стратегия поиска

Метод использует информацию, полученную на текущем шаге для определения направления поиска на последующем шаге. Реализуется в два этапа [3-5].

I этап — исследующий поиск. На этом этапе осуществляется выбор перспективного направления уменьшения функции. Точка, из которой на k -ой итерации осуществляется поиск перспективного направления называется базовой X_0^k .

Задается величина шага Δx_j , $j=1, n$, которая может быть различной для разных координатных направлений. Вычисляются значения функции $f(x_1, \dots, x_j + \Delta x_j, \dots, x_n)$ и $f(x_1, \dots, x_j - \Delta x_j, \dots, x_n)$, и по каждой из пере-

менных определяется направление уменьшения функции. В результате исследующего поиска определяют точку X^k которая вместе с точкой X_{δ}^k задает прямую — направление поиска (рисунок 3).

II этап – поиск по образцу. На этом этапе осуществляется движение вдоль выбранного направления в соответствии с выражением

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \lambda(X^{(k)} - X^{(k-1)}), \quad (3.1)$$

где λ представляет собой ускоряющий множитель, при $\lambda=1$ выражение (3.1) примет вид $X^{(k+1)} = 2X^{(k)} - X^{(k-1)}$. Движение вдоль прямой осуществляется до тех пор, пока выполняется условие (2.2). Если в точке X^{k+1} получено значение функции большее, чем в предыдущей точке X^k , движение вдоль выбранного направления прекращают и точку объявляют текущей базовой точкой. Одна итерация завершается. Далее этапы поиска повторяются.

В ситуации, когда исследующий поиск по всем координатам не приводит к результату, изменяют длину шага, уменьшая Δx_j в несколько раз, например,

$\Delta x_j := \frac{\Delta x_j}{10}$. Графическая интерпретация метода Хука-Дживса представлена на рисунке 3.

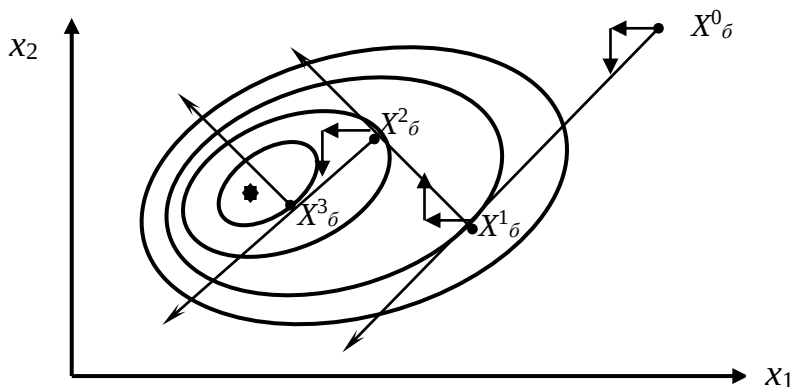


Рисунок 3 — Приближение к минимуму функции на основе алгоритма Хука - Дживса

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку X^0 ; число $\varepsilon > 0$ для завершения алгоритма; начальные величины шагов по координатным направлениям $\Delta_i \geq \varepsilon$, $i=1, n$; ускоряющий множитель $\alpha > 0$; коэффициент уменьшения шага $\lambda > 1$. Положить $Y^1 = X^0$, $i=1$, $k=0$.

Введем вектор-столбец направления d_i . Все компоненты вектора равны нулю, кроме i -й компоненты.

$$d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad d_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad d_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Шаг 2. Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению:

а) если $f(Y^i + \Delta_i d_i) < f(Y^i)$, то есть

$$f(y_1^i, \dots, y_i^i + \Delta_i, \dots, y_n^i) < f(y_1^i, \dots, y_i^i, \dots, y_n^i),$$

шаг считается удачным. В этом случае положить $Y^{i+1} = Y^i + \Delta_i d_i$ и перейти к шагу 3;

б) если в п. «а» шаг неудачен, то делается шаг в противоположном направлении. Если $f(Y^i - \Delta_i d_i) < f(Y^i)$, то $Y^{i+1} = Y^i - \Delta_i d_i$ и перейти к шагу 3.

в) если шаги в п. «а» и «б» неудачны, то $Y^{i+1} = Y^i$.

Шаг 3. Проверить условия:

а) если $i < n$, то положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 2 (продолжить исследующий поиск по направлениям);

б) если $i = n$, проверить успешность исследующего поиска:

- если $f(Y^{n+1}) < f(X^k)$, перейти к шагу 4;

- если $f(Y^{n+1}) \geq f(X^k)$, перейти к шагу 5.

Шаг 4. Провести поиск по образцу. Положить $Z^l = X^k$, $Z^{l+1} = Y^{n+1}$, $l = 0, 1, 2, \dots$

Двигаться вдоль выбранного направления

$$Z^{l+2} = Z^{l+1} + \alpha(Z^{l+1} - Z^l), \quad l = l + 1,$$

пока значения функции будут уменьшаться $f(Z^{l+2}) < f(Z^{l+1})$.

Как только неравенство нарушится, положить $k = k + 1$, $i = 1$, $X^k = Z^{l+1}$, $Y^1 = X^k$ и перейти к шагу 2.

Шаг 5. Проверить условие окончания:

а) если все $\Delta_i \leq \varepsilon$ поиск закончить и считать $X^* \cong X^k$;

б) для тех i , для которых $\Delta_i > \varepsilon$, уменьшить величину шага

$\Delta_i = \frac{\Delta_i}{\lambda}$. Положить $Y^1 = X^k$, $X^{k+1} = X^k$, $k = k + 1$, $i = 1$ и перейти к шагу 2.

Пример 3. Выполнить приближение к локальному минимуму функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на основе двух итераций в соответствии с методом Хука-Дживса.

1⁰. Начальная точка поиска $X^0 = (0,5;1)^T$; число $\varepsilon > 0,05$ для завершения алгоритма; начальные величины шагов по координатным направлениям $\Delta_i = 0,1, i=1, 2$; ускоряющий множитель $\alpha=1$; коэффициент уменьшения шага $\lambda=0,1$. Положить $Y^1 = X^0 = (0,5;1)^T, i=1, k=0$. При этом значение функции в базовой точке равно $f(Y^1) = f(X^0) = f(0,5;1)^T = 2$.

2⁰¹. Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению $X_i, i=1$:

$f(0,5+0,1;1) = f(0,6;1) = 2,32$ — шаг неудачен;

$f(0,5-0,1;1) = f(0,4;1) = 1,72$ — лучшее направление для переменной x_1 , $Y^2 = (0,4;1)$.

3⁰¹. Проверить условие: $i < 2, i=i+1=2$, перейти к шагу 2 и продолжить поиск по координатным направлениям.

2⁰². Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению $X_i, i=2$:

$f(0,4;1+0,1) = f(0,4;1,1) = 1,97$ — шаг неудачен;

$f(0,4;1-0,1) = f(0,4;0,9) = 1,49$ — лучшее направление для переменной x_2 .

3⁰². Проверить условие: $i=2$, проверить успешность исследующего поиска: $f(Y^{n+1}) = f(Y^3) = 1,49 < f(X^0) = f(0,5;1) = 2, Y^3 = (0,5;1)$, перейти к шагу 4.

4¹. Выполнить поиск по образцу, положить $l=0, Z^0 = X^0, Z^1 = Y^3$, тогда $Z^{l+2} = Z^{l+1} + \alpha(Z^{l+1} - Z^l) = 2Z^{l+1} - Z^l = 2(0,4;0,9) - (0,5;1) = (0,3;0,8)$ $f(Z^{l+2}) = f(Z^2) = 1,06 < f(Z^{l+1}) = f(Z^1) = 1,49, l=l+1=1$. Поскольку поиск по образцу успешен, двигаемся дальше вдоль выбранного направления, увеличивая l .

$f(Z^3) = f(0,2;0,7) = 0,71 < f(Z^1) = 1,06, l=l+1=2$.

$f(Z^4) = f(0,1;0,6) = 0,44 < f(Z^2) = 0,71, l=l+1=3$.

$f(Z^5) = f(0,0;0,5) = 0,25 < f(Z^3) = 0,71, l=l+1=4$.

$f(Z^6) = f(-0,1;0,4) = 0,14 < f(Z^4) = 0,44, l=l+1=5$.

$f(Z^7) = f(-0,2;0,3) = 0,11 < f(Z^5) = 0,25, l=l+1=6$.

$f(Z^8) = f(-0,3;0,2) = 0,16 > f(Z^2) = 0,14$, поиск по образцу прекращается, $k=k+1=1, i=1, X^1 = Z^7, Y^1 = X^1 = (-0,2;0,3)$ и перейти к шагу 2.

2¹¹. Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению x_i , $i=1$:

$$f(-0,2+0,1; 0,3) = f(-0,1; 0,3) = 0,08 \text{ — шаг удачный, } Y^2 = (-0,1; 0,3).$$

3¹¹. Проверить условие: $i < 2$, $i=i+1=2$, перейти к шагу 2.

2¹². Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению x_i , $i=2$:

$$f(-0,1; 0,3+0,1) = f(-0,1; 0,4) = 0,14 \text{ — шаг неудачен;}$$

$$f(-0,1; 0,3-0,1) = f(-0,1; 0,2) = 0,04 \text{ — лучшее направление для переменной } x_2.$$

3¹². Проверить условие: $i=2$, проверить успешность исследующего поиска: $f(Y^3) = 0,04 < f(X^1) = f(-0,2; 0,3) = 0,11$, $Y^3 = (-0,1; 0,2)$, перейти к шагу 4.

4¹. Выполнить поиск по образцу, положить $l=0$, $Z^0 = X^1$, $Z^1 = Y^3$, тогда

$$Z^{l+2} = 2Z^{l+1} - Z^l = 2(-0,1; 0,2) - (-0,2; 0,3) = (0; 0,1)$$

$f(Z^{l+2}) = f(Z^2) = 0,01 < f(Z^{l+1}) = f(Z^1) = 0,04$, $l=l+1=1$. Поскольку поиск по образцу успешен, двигаемся дальше вдоль выбранного направления, увеличивая l .

$f(Z^3) = f(0,1; 0) = 0,02 > f(Z^1) = 0,01$, поиск по образцу прекращается, $k=k+1=2$, $i=1$, $X^1 = Z^2$, $Y^1 = X^2 = (0; 0,1)$ и перейти к шагу 2.

На следующей итерации исследующий поиск может не привести к успеху. В такой ситуации необходимо уменьшить величину шага по координатным направлениям и продолжить вычисления согласно алгоритму.

В результате выполнения двух итераций получили следующий результат: $X^* = X^2 = (0; 0,1)$, $f(X^*) = 0,01$.

3.2. Метод поиска по симплексу

Требуется найти безусловный минимум функции, то есть найти такую точку

$$X^* \in \mathfrak{R}^n, \text{ что } f(X^*) = \min_{X \in \mathfrak{R}^n} f(X).$$

Стратегия метода

В основу метода поиска по симплексу положено построение последовательности систем $n+1$ точек $X^i(k)$, $i=1, \dots, n+1$, которые являются вершинами регулярного симплекса, то есть выпуклого многогранника, образованного $n+1$ вершиной [4,5]. Например, если $n=2$, то регулярный симплекс представляет собой равносторонний треугольник. Точки системы $X^i(k+1)$, $i=1, \dots, n+1$ совпадают с точками системы $X^i(k)$, $i=1, \dots, n+1$, кроме $i=j$, где точка $X^j(k)$ — наихудшая в системе $X^i(k)$, $i=1, \dots, n+1$, то есть $f(X^j(k)) = \max_{1 \leq i \leq n+1} f(X^i(k))$. Точка $X^j(k)$

заменяется на другую по следующим правилам. Худшая, с точки зрения значений функции вершина, отражается относительно центра тяжести $X^C(k)$ остальных точек симплекса (рисунок 4а). Системе точек k принадлежат точки X^1, X^2 и X^3 . Если точка X^1 является наихудшей в системе k , то она отражается через центр тяжести вершин X^2 и X^3 . Строится $k+1$ -я система точек. В нее входят точки X^2 и X^3 и новая точка X^4 , построенная в результате отражения точки X^1 (рисунок 4б).

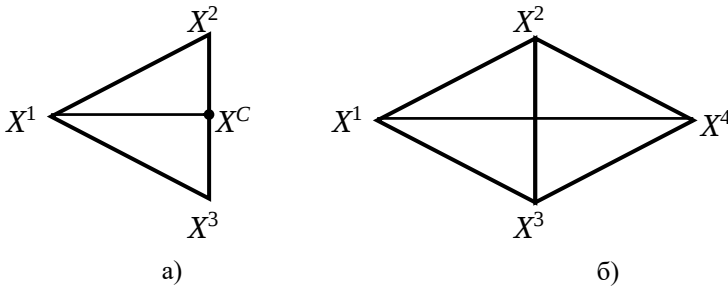


Рисунок 4 — Отражение точек в регулярном симплексе:
 а) положение центра тяжести; б) построение отраженной точки

Построение регулярных симплексов завершается, когда разность между минимальными значениями функции в системах k и $k+1$ достаточно малы, то есть

$$\left| \min \{f(X^i(k))\} - \min \{f(X^i(k+1))\} \right| < \varepsilon, \quad i=1, \dots, n+1. \quad (3.2)$$

Реализация алгоритма основана на вычислениях двух типов: построении регулярного симплекса при заданных базовой точке и масштабном множителе и расчете координат отраженной точки.

1. Построение симплекса. Пусть X^0 — начальная (базовая) точка поиска; α — масштабный множитель, определяющий размер симплекса. Координаты остальных n вершин определяются по формуле:

$$x^i = \begin{cases} x_j^0 + \delta_1, & \text{если } j \neq i \\ x_j^0 + \delta_2, & \text{если } j = i \end{cases}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \quad (3.3)$$

где

$$\delta_1 = \alpha \cdot \frac{\sqrt{N+1} + N - 1}{N\sqrt{2}}, \quad \delta_2 = \alpha \cdot \frac{\sqrt{N+1} - 1}{N\sqrt{2}}, \quad (3.4)$$

В выражении (3.3) верхний индекс – номер вершины, нижний – номер компоненты в векторе X .

2. Отражение вершины относительно центра тяжести. Пусть X^j – вершина, подлежащая отражению. Центр тяжести остальных n вершин расположен в точке

$$X^C = \frac{1}{n} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n X^i, \quad (3.5)$$

Все точки прямой, проходящей через X^j и X^C задаются выражением

$$X = X^j + \lambda(X^C - X^j). \quad (3.6)$$

Регулярный симплекс можно построить, если выбрать $\lambda=2$, тогда выражение (3.6) примет вид

$$X_{нов}^j = 2X^C - X_{отр}^j,$$

где $X_{нов}^j$ — точка $k+1$ -го симплекса, $X_{отр}^j$ — точка k -го симплекса, подлежащая отражению.

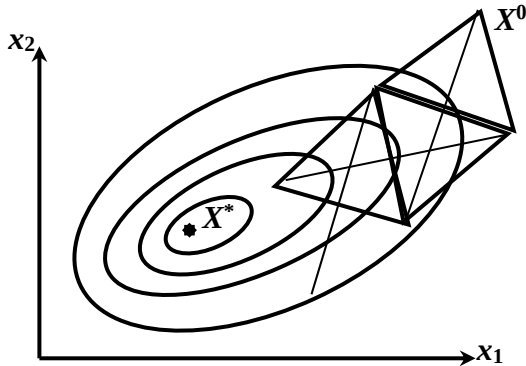


Рисунок 5 — Приближение к точке минимума функции на основе метода поиска по симплексу

Замечания

1. Если вершина, которой соответствует наибольшее значение целевой функции построена на предыдущей итерации, то вместо нее берется вершина, которой соответствует следующее по величине значение функции.

2. Если некоторая вершина симплекса повторяется на протяжении более, чем M итераций, то необходимо уменьшить размеры симплекса и построить новый, выбрав в качестве базовой точку ту, которой соответствует минимальное значение целевой функции. Предложено принимать $M=1,65N+0,5N^2$, где N – размерность задачи, а M необходимо округлить до ближайшего целого.

Алгоритм

Шаг 1. Задаются параметры задачи: базовая точка X^0 , масштабный множитель α , точность вычислений ε , предельное число итераций M , коэффициент уменьшения симплекса $\gamma > 1$. Положить $k=0$. Определить первоначальный симплекс в соответствии с (3.3) и (3.4).

Шаг 2. Среди вершин симплекса выбирается та, в которой функция принимает наибольшее значение.
$$f(X^j(k)) = \max_{1 \leq i \leq n+1} f(X^i(k)).$$

Шаг 3. Строится новый симплекс в соответствии с (3.5) и (3.6).

Шаг 4. Проверяются условия замечаний 1 и 2. Если вершина симплекса $X_{нов}^j$ не принадлежала ранее построенным симплексам, то $k=k+1$ и перейти к шагу 2; иначе перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверяется условия завершения:

- замечание 3 выполнено, $X^* \cong \min_j \{X^j\}$;

- иначе – перейти к шагу 2.

Пример 3. Выполнить приближение к локальному минимуму функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на основе двух итераций в соответствии с методом поиска по симплексу.

1⁰. Начальная точка поиска $X^0(0) = (0,5; 1)^T$; масштабный множитель $\alpha = 0,5$. Положить $k=0$. Определим первоначальный симплекс в соответствии с (10) и (11) и вычислим значения функции в вершинах k -го симплекса:

$$\delta_1 = \alpha \cdot \frac{\sqrt{N+1} + N - 1}{N\sqrt{2}} = 0,5 * \frac{\sqrt{3} + 1}{2\sqrt{2}} = 0,483;$$

$$\delta_2 = \alpha \cdot \frac{\sqrt{N+1} - 1}{N\sqrt{2}} = 0,5 * \frac{\sqrt{3} - 1}{2\sqrt{2}} = 0,129.$$

$$X^1(0) = [0,5 + 0,129; 1 + 0,483] = [0,629; 1,483];$$

$$X^2(0) = [0,5 + 0,483; 1 + 0,129] = [0,983; 1,129]$$

$$f(X^0(0)) = 2; f(X^1(0)) = 3,93; f(X^2(0)) = 4,31.$$

2⁰. Среди вершин симплекса выбирается та, в которой функция принимает наибольшее значение. Это вершина с координатами $X^2(0) = [0,983; 1,129]$.

Значение функции в этой вершине симплекса: $f(X^2(0)) = 4,32$. Она подлежит отражению.

3⁰. Для отражения вершины вычисляем координату центра тяжести остальных вершин симплекса в соответствии с (13):

$$X^C(0) = \frac{1}{2} [0,5 + 0,629; 1 + 1,483] = [0,56; 1,24].$$

Вычисляем координаты отраженной вершины:

$$X_{нов}^j = 2X^C - X_{отр}^j = 2X^C(0) - X_{отр}^2(0) = 2 \cdot [0,56; 1,24] - [0,983; 1,129] = [0,147; 1,354].$$

4⁰. Вновь построенная вершина не принадлежит ранее построенным симплексам; $k=k+1=1$. Новый симплекс представляется следующими вершинами:

$$X^0(1) = X^0(0) = [0,5; 1];$$

$$X^1(1) = X^1(0) = [0,629; 1,483];$$

$$X^2(1) = X_{omp} = [0,147; 1,354];$$

$$f(X^0(1)) = 2; f(X^1(1)) = 3,93; f(X^2(1)) = 2,07.$$

2¹. Среди вершин симплекса выбирается та, в которой функция принимает наибольшее значение. Это вершина с координатами $X^1(1) = [0,629; 1,483]$.

Значение функции в этой вершине симплекса: $f(X^1(1)) = 3,93$. Она подлежит отражению.

3¹. Для отражения вершины вычисляем координату центра тяжести остальных вершин симплекса в соответствии с (13):

$$X^C(0) = \frac{1}{2} [0,5 + 0,147; 1 + 1,354] = [0,323; 1,177].$$

Вычисляем координаты отраженной вершины:

$$\begin{aligned} X_{нов}^j &= 2X^C - X_{omp}^j = 2 \cdot [0,323; 1,177] - [0,629; 1,483] = \\ &= [0,017; 0,87]. \end{aligned}$$

4¹. Вновь построенная вершина не принадлежит ранее построенным симплексам; $k=k+1=1$. Новый симплекс представляется следующими вершинами:

$$X^0(2) = X^0(1) = [0,5; 1];$$

$$X^1(2) = X_{omp} = [0,017; 0,87];$$

$$X^2(2) = X^2(1) = [0,147; 1,354];$$

$$f(X^0(2)) = 2; f(X^1(2)) = 0,77; f(X^2(2)) = 2,07.$$

На этом две итерации завершены. В новой точке, полученной на второй итерации, значение функции уменьшилось по сравнению с начальным значением.

4. МЕТОДЫ ПЕРВОГО ПОРЯДКА (ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ)

Методы первого порядка, позволяющие решать задачу безусловной минимизации функций нескольких переменных основаны на использовании свойств производной функции:

- первая производная функции обращается в нуль в стационарных точках;
- направление поиска выбирается в соответствии с градиентом.

Предполагается, что функция $f(X)$ и ее первая производная $\nabla f(X)$ существуют и непрерывны. Компоненты градиента должны быть представлены в аналитической форме или вычислены с достаточной точностью на основе численных методов.

Все градиентные методы основаны на итерационной процедуре, реализуемой в соответствии с соотношением:

$$X^{k+1} = X^k + \alpha^k S(X^k), \quad (4.1)$$

где X^k — текущее приближение к решению X^* ; $S(X^k) = S^k$ — направление поиска в n -мерном пространстве переменных x_i , $i=1, \dots, n$; α^k — длина шага вдоль выбранного направления.

Способы определения направления поиска S^k и длины шага вдоль этого направления α^k связаны с особенностями реализации того или иного метода.

4.1. Метод Коши (метод наискорейшего спуска)

Пусть дана функция $f(X)$, ограниченная снизу на множестве $\mathfrak{R}^n$ и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти безусловный минимум функции $f(X)$ на множестве допустимых решений, то есть найти такую точку $X^* \in \mathfrak{R}^n$, что

$$f(X^*) = \min_{X \in \mathfrak{R}^n} f(X).$$

Стратегия поиска

Разложим функцию $f(X)$ в окрестности точки X^{k+1} в ряд Тейлора:

$$f(X^{k+1}) = f(X^k) + \nabla f(X^k)^T \Delta X^k + O_2(\Delta X^k), \quad (4.2)$$

где $\nabla f(X^k)$ — градиент функции $f(X)$ в точке X^k ; $\Delta X^k = X^{k+1} - X^k$ — вектор приращения переменных функции $f(X)$; $O_2(\Delta X^k)$ — члены ряда, имеющие второй порядок и выше.

Ограничимся в выражении (4.2) членами не выше первого порядка, тогда выражение (4.2) примет вид:

$$f(X^{k+1}) = f(X^k) + \nabla f(X^k)^T \Delta X^k. \quad (4.3)$$

Приращение вектора переменных ΔX^k должно выбираться таким образом, чтобы выполнялось неравенство $f(X^{k+1}) < f(X^k)$. Уменьшение значения функции в точке X^{k+1} может быть осуществлено за счет выбора 2-го слагаемого, а именно, $\nabla f(X^k) < 0$. В этом случае направление поиска минимума функции будет совпадать с направлением, противоположным градиенту $S(X^k) = -\nabla f(X^k)$. Тогда формула (4.1) примет окончательный вид [4,5]:

$$X^{k+1} = X^k - \alpha^k \nabla f(X^k). \quad (4.4)$$

Замечания

1. Величина шага α вдоль выбранного направления в выражении (4.4) может быть:

- постоянной $\alpha = \text{const}$, и не зависящей от выбора точки X^k и номера итерации; в этом случае реализуется градиентный метод с постоянным шагом;
- может определяться на каждой итерации, и α^k вычисляется путем решения задачи минимизации функции $f(X)$ вдоль выбранного направления $S(X^k) = -\nabla f(X^k)$ на основе методов однопараметрической оптимизации [6]; в этом случае реализуется метод Коши.

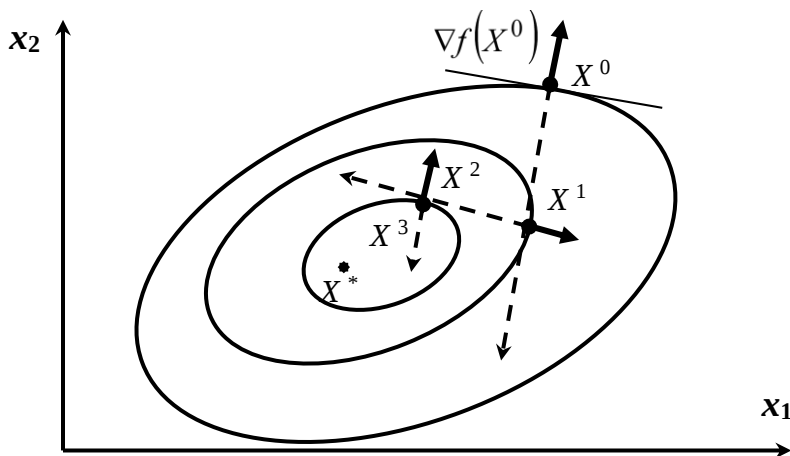


Рисунок 6 — Приближение к точке минимума функции на основе метода наискорейшего спуска (Коши)

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку X^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число итераций M . Найти градиент функции в произвольной точке.

Шаг 2. Положить $k=0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(X^k)$

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$:

- а) если критерий выполнен, то $X^* = X^k$;
- б) иначе перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение равенства $k \geq M$:

- а) если неравенство выполнено, то $X^* = X^k$;

б) иначе перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить величину α^k в соотношении $X^{k+1} = X^k - \alpha^k \nabla f(X^k)$ на основе метода квадратичной аппроксимации [6], положив $\alpha^k_1=0$, $\Delta\alpha=0,1$.

Шаг 7. Вычислить $X^{k+1} = X^k - \alpha^k \nabla f(X^k)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условий:

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_1, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2$$

а) если оба условия выполнены, то расчет окончен и $X^* = X^{k+1}$;

б) если хотя бы одно из неравенств не выполнено, то положить $k=k+1$ и перейти к шагу 3.

Пример 4. Выполнить приближение к локальному минимуму функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на основе двух итераций в соответствии с методом наискорейшего спуска (Коши).

1. Зададим $X^0 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \end{bmatrix}$, $\varepsilon_1=0,1$, $\varepsilon_2=0,15$, $M=1$. Градиент функции в произволь-

ной точке равен $\nabla f(X) = \begin{bmatrix} 4x_1 + x_2 \\ x_1 + 2x_2 \end{bmatrix}$.

2. Положим $k=0$.

3⁰. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix}$.

4⁰. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^0)\| = 3,9 > 0,1$. Перейти к шагу 5.

5⁰. Проверим условие $k=0 < 1$, перейти к шагу 6.

6⁰. Вычислим величину шага вдоль выбранного направления α^0 на основе метода квадратичной аппроксимации [6]. Для этого выполним следующие действия.

1) $\alpha^0_1=0$; $X(\alpha^0_1) = X^0 - \alpha^0_1 \cdot \nabla f(X^0) = \begin{pmatrix} x_1 = 0,5 - 0 \cdot 3 \\ x_2 = 1 - 0 \cdot 2,5 \end{pmatrix} = (0,5; 1)^T$; Зна-

чение функции в вычисленной точке равно $f_1 = f(X(\alpha^0_1)) = 2$;

2) $\alpha^0_2 = \alpha^0_1 + \Delta\alpha = 0,1$;

$X(\alpha^0_2) = X^0 - \alpha^0_2 \cdot \nabla f(X^0) = \begin{pmatrix} x_1 = 0,5 - 0,1 \cdot 3 \\ x_2 = 1 - 0,1 \cdot 2,5 \end{pmatrix} = (0,2; 0,75)^T$

Значение функции в вычисленной точке равно $f_2 = f(X(\alpha^0_2)) = 0,7925$;

3) Так как $f^1 > f^2$, то $\alpha^0_3 = \alpha^0_1 + 2\Delta\alpha = 0,2$;

$$X(\alpha_3^0) = X^0 - \alpha_3^0 \cdot \nabla f(X^0) = \begin{pmatrix} x_1 = 0,5 - 0,2 \cdot 3 \\ x_2 = 1 - 0,2 \cdot 2,5 \end{pmatrix} = (-0,1; 0,5)^T.$$

Значение функции в вычисленной точке равно $f_3 = f(X(\alpha_2^0)) = 0,22$;

По имеющимся значениям α_1^0 , α_2^0 и α_3^0 и значениям функций f^1 , f^2 и f^3 вычисляем значение α^0 , минимизирующее функцию вдоль выбранного направления $\alpha^0 = 0,24$.

7⁰. Вычислим координату точки

$$X^1 = X^0 - \alpha^0 \nabla f(X^0) = \begin{pmatrix} x_1^1 = 0,5 - 0,24 \cdot 3 \\ x_2^1 = 1 - 0,24 \cdot 2,5 \end{pmatrix} = (-0,22; 0,4)^T.$$

8⁰. Вычислим $\|X^1 - X^0\| = 0,937 > 0,15$.

Вычислим $|f(X^1) - f(X^0)| = 1,83 > 0,1$. Полагаем $k=k+1=1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^1) = \begin{bmatrix} -0,48 \\ 0,58 \end{bmatrix}$.

4¹. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^1)\| = 0,752 > 0,1$. Перейти к шагу 5.

5¹. Проверим условие $k=1 < 2$, перейти к шагу 6.

6¹. Вычислим величину шага вдоль выбранного направления α^1 на основе метода квадратичной аппроксимации [6]: $\alpha^1 = 0,546$.

7⁰. Вычислим координату точки

$$X^2 = X^1 - \alpha^1 \nabla f(X^1) = \begin{pmatrix} x_1^2 = 0,22 - 0,546 \cdot (-0,48) \\ x_2^2 = 0,44 - 0,546 \cdot 0,58 \end{pmatrix} = (0,04; 0,08)^T.$$

Две итерации выполнены. Считаем точку X^2 приближением к минимуму функции $f(X)$, то есть $X^* \cong X^2 = \begin{bmatrix} 0,04 \\ 0,08 \end{bmatrix}$.

4.2. Методы сопряженных направлений

Направление антиградиента функции нескольких переменных приводит точно к точке ее минимума только в определенных случаях [4,5]. Так, например,

для функции двух переменных перспективное направление поиска минимума функции совпадает с направлением антиградиента, если линии ее равного уровня представляют собой концентрические окружности (рисунок 7а). В силу нелинейности функций перспективное направление поиска — вектор $\bar{P}$ может отклоняться от антиградиента (рисунок 7б). Этот вектор может быть вычислен точно с помощью матрицы Гессе или приближенно по системе сопряженных направлений.

Определение 8. Пусть H — симметрическая матрица размера $n \times n$. Векторы $s^1, s^2, \dots, s^n$ называются H -сопряженными, если $(s^i)^T \cdot H \cdot s^j = 0$ для всех $i \neq j$.

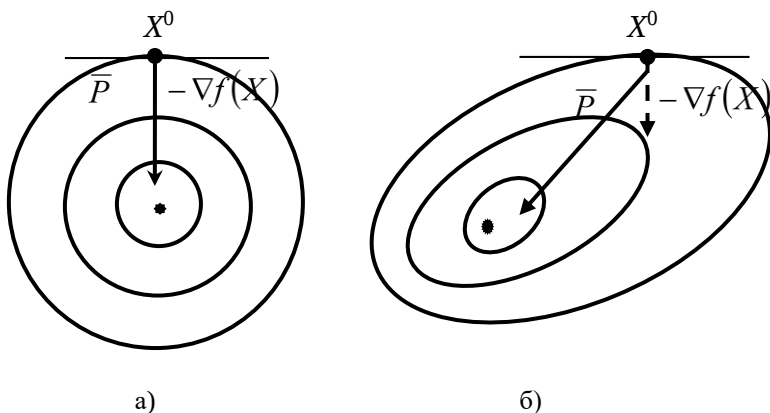


Рисунок 7 — Перспективное направление поиска минимума функции

В методе сопряженных направлений используется тот факт, что минимум квадратичной функции размерности n может быть найден не более, чем за n шагов при условии, что поиск ведется вдоль сопряженных относительно матрицы Гессе направлений. Так как достаточно большой класс целевых функций может быть представлен в окрестности точки минимума своей квадратичной аппроксимацией, описанная идея применяется и для неквадратичных функций.

4.3. Метод Флетчера - Ривса

Пусть дана функция $f(X)$, ограниченная снизу на множестве $\mathfrak{R}^n$ и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти безусловный минимум функции $f(X)$ на множестве допустимых решений, то есть найти такую точку $X^* \in \mathfrak{R}^n$, что

$$f(X^*) = \min_{X \in \mathfrak{R}^n} f(X).$$

Стратегия поиска

Стратегия метода состоит в построении последовательности точек $\{X^k\}$, $k=0,1, \dots$, таких что, $f(X^{k+1}) < f(X^k)$, $k=0,1, \dots$. Точки последовательности $\{X^k\}$ вычисляются по правилу [4,5]:

$$X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k, k = 0,1,\dots; \quad (4.5)$$

$$S^k = -\nabla f(X^k) + \beta_{k-1} S^{k-1}; \quad (4.6)$$

$$S^0 = -\nabla f(X^0); \quad (4.7)$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\|\nabla f(X^k)\|^2}{\|\nabla f(X^{k-1})\|^2} \quad (4.8)$$

Точка X^0 задается пользователем, величина шага α^k определяется для каждого значения k путем минимизации функции $f(X)$ вдоль выбранного направления на основе методов однопараметрической оптимизации.

Вычисление величины β_{k-1} по формуле (4.6) обеспечивает для квадратичной формы $f(X) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j$ построение последовательности H -сопряженных направлений $S^1, S^2, \dots, S^k, \dots$, для которых $(S^i)^T \cdot H \cdot S^j = 0$, для всех $i, j = 0,1,\dots; i \neq j$. При этом в точках последовательности $\{X^k\}$ градиенты функции $f(X)$ взаимно перпендикулярны, то есть $(\nabla f(X^{k+1}))^T \cdot \nabla f(X^k) = 0, k = 0,1,\dots$.

Для квадратичных функций $f(X)$ с матрицей Гессе $H > 0$ метод Флетчера-Ривса является конечным и сходится за число шагов, не превышающее n — размерность вектора X .

При минимизации неквадратичных функций метод не является конечным и погрешности в решении задачи минимизации шага вдоль выбранного направления поиска приводят к нарушению не только перпендикулярности градиентов, но и H -сопряженности направлений.

Алгоритм

Шаг 1. Задать X^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число M . Найти градиент функции в произвольной точке.

Шаг 2. Положить $k=0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(X^k)$

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$:

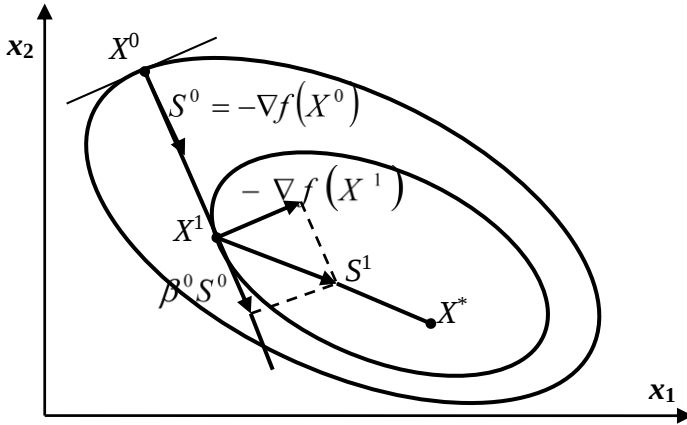


Рисунок 8 — Приближение к точке минимума функции на основе метода Флетчера - Ривса

- а) если критерий выполнен, то $X^* = X^k$;
- б) иначе перейти к **шагу 5**.

Шаг 5. Проверить выполнение равенства $k \geq M$:

- а) если неравенство выполнено, то $X^* = X^k$;
- б) иначе, при $k=0$ перейти к **шагу 6**, а при $k \geq 1$ перейти к **шагу 7**.

Шаг 6. Определить $S^0 = -\nabla f(X^0)$. Перейти к **шагу 9**.

Шаг 7. Определить $\beta_{k-1} = \frac{\|\nabla f(X^k)\|^2}{\|\nabla f(X^{k-1})\|^2}$

Шаг 8. Определить $S^k = -\nabla f(X^0) + \beta_{k-1}S^{k-1}$.

Шаг 9. Вычислить величину α^k в соотношении $X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k$ на основе метода полиномиальной аппроксимации, положив $\alpha^k_1=0$, $\Delta\alpha=0,1$.

Шаг 10. Вычислить $X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий:

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_1, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2$$

- а) если оба условия выполнены, то расчет окончен и $X^* = X^k$;
- б) если хотя бы одно из неравенств не выполнено, то положить $k=k+1$ и перейти к **шагу 3**.

Пример 5. Выполнить приближение к локальному минимуму функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на основе двух итераций в соответствии с методом Флетчера-Ривса.

1. Зададим $X^0 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \end{bmatrix}$, $\varepsilon_1 = 0,1$, $\varepsilon_2 = 0,15$, $M = 1$. Градиент функции в произ-

вольной точке равен $\nabla f(X) = \begin{bmatrix} 4x_1 + x_2 \\ x_1 + 2x_2 \end{bmatrix}$.

2. Положим $k=0$.

3⁰. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix}$.

4⁰. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^0)\| = 3,9 > 0,1$. Перейти к шагу 5.

5⁰. Проверим условие $k=0 < 1$, перейти к шагу 6.

6⁰. Определим $S^0 = -\nabla f(X^0) = -\begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix}$. Перейти к шагу 9.

9⁰. Вычислим величину шага вдоль выбранного направления α^0 на основе метода квадратичной аппроксимации : $\alpha^0 = 0,24$. Подробное описание вычислений приведено в примере 4, пункт 6⁰.

10⁰. Вычислим координату точки

$$X^1 = X^0 + \alpha^0 S^0 = \begin{pmatrix} x_1^1 = 0,5 - 0,24 \cdot 3 \\ x_2^1 = 1 - 0,24 \cdot 2,5 \end{pmatrix} = (-0,22; 0,4)^T.$$

11⁰. Вычислим $\|X^1 - X^0\| = 0,937 > 0,15$.

Вычислим $|f(X^1) - f(X^0)| = 1,83 > 0,15$. Полагаем $k=k+1=1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^1) = \begin{bmatrix} -0,48 \\ 0,58 \end{bmatrix} (-0,48; 0,58)^T$.

4¹. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^1)\| = 0,752 > 0,1$. Перейти к шагу 5.

5¹. Проверим условие $k=1 < 2$, при $k \geq 1$ перейти к шагу 7.

$$7^1. \text{ Определим } \beta_0 = \frac{\|\nabla f(X^1)\|^2}{\|\nabla f(X^0)\|^2} = 0,0373.$$

8¹. Определим

$$S^1 = -\nabla f(X^1) + \beta_0 S^0 = \begin{pmatrix} s_1^1 = -(-0,48) + 0,0373 \cdot (-3) \\ s_2^1 = -0,58 + 0,0373 \cdot (-2,5) \end{pmatrix}$$

$$S^1 = \begin{bmatrix} 0,368 \\ -0,673 \end{bmatrix}$$

9¹. Вычислим величину шага вдоль выбранного направления α^1 на основе метода квадратичной аппроксимации: $\alpha^1 = 0,595$.

10¹. Вычислим координату точки

$$X^2 = X^1 + \alpha^1 S^1 = \begin{pmatrix} x_1^2 = -0,22 - 0,595 \cdot 0,368 \\ x_2^2 = 0,4 - 0,595 \cdot (-0,673) \end{pmatrix} = (0,0010; 0,000)^T.$$

Две итерации выполнены. Считаем точку X^2 приближением к минимуму функции $f(X)$, то есть $X^* \cong X^2 = \begin{bmatrix} 0,0010 \\ 0,000 \end{bmatrix}$.

На рисунке 9 представлен процесс приближения к точке минимума методами Коши и Флетчера-Ривса.

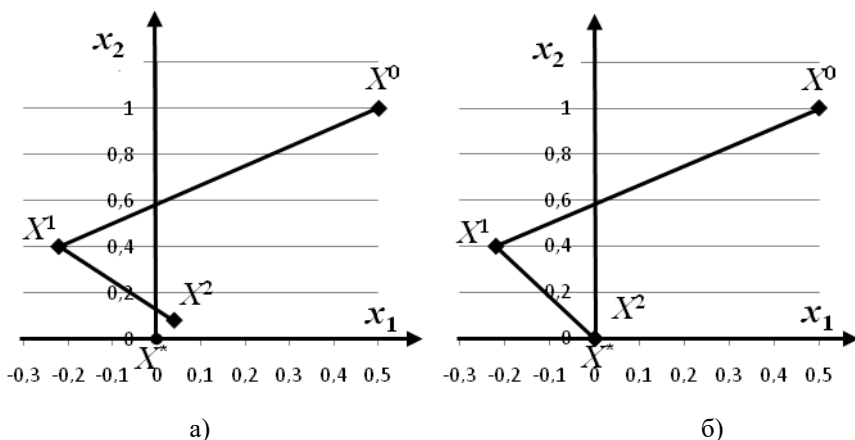


Рисунок 9 — Процесс приближения к точке минимума на основе методов:
а) Коши; б) Флетчера - Ривса

Учитывая, что точное значение минимума функции соответствует $X^* = (0; 0)^T$, можно заметить, что метод Флетчера-Ривса позволяет достигнуть точки минимума за две итерации.

4.4. Метод Дэвидона - Флетчера - Пауэлла

Пусть дана функция $f(X)$, ограниченная снизу на множестве $\mathcal{R}^n$ и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти безусловный минимум функции $f(X)$ на множестве допустимых решений, то есть найти такую точку $X^* \in \mathcal{R}^n$, что

$$f(X^*) = \min_{X \in \mathcal{R}^n} f(X).$$

Стратегия поиска

Стратегия метода Дэвидона-Флетчера-Пауэлла (Д-Ф-П) состоит в построении последовательности точек $\{X^k\}$, $k=0, 1, \dots$, таких что, $f(X^{k+1}) < f(X^k)$, $k=0, 1, \dots$. Точки последовательности $\{X^k\}$ вычисляются по правилу [4,5]:

$$X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k, \quad k = 0, 1, \dots; \quad (4.9)$$

$$S^k = -A^k \nabla f(X^k), \quad (4.10)$$

где A^k – матрица размера $n \times n$, которая вычисляется по правилу:

$$A^{k+1} = A^k + A_c^k, \quad A^0 = E, \quad (4.11)$$

$$A_c^k = \frac{\Delta X^k (\Delta X^k)^T}{(\Delta X^k)^T \Delta g^k} - \frac{A^k \Delta g^k (\Delta g^k)^T A^k}{(\Delta g^k)^T A^k \Delta g^k}, \quad (4.12)$$

где $\Delta X^k = X^{k+1} - X^k$, $\Delta g^k = \nabla f(X^{k+1}) - \nabla f(X^k)$, E — единичная матрица размера $n \times n$.

Точка X^0 задается пользователем, величина шага α^k определяется в результате решения задачи минимизации функции $f(X)$ вдоль выбранного направления S^k на основе методов однопараметрической минимизации.

Формулы (4.11) и (4.12) при аналитическом решении задачи минимизации $f(X)$ обеспечивают построение последовательности $\{A^k\}$ положительно определенных матриц, таких, что $A^k \rightarrow H^{-1}(X^*)$ при $k \rightarrow \infty$. Следствием этого для квадратичной функции направления S^k будут H -сопряженными и, следовательно, алгоритм Д-Ф-П сойдется не более чем за n шагов.

Для неквадратичных функций $f(X)$ алгоритм перестает быть конечным и его сходимость зависит от точности решения задачи минимизации шага вдоль направления поиска. Глобальную сходимость алгоритма можно гарантировать лишь при его обновлении через каждые n шагов, то есть, когда в выражении (4.10)

$$A^k = \begin{cases} E, & k \in J; \quad J = \{0, n, 2n, \dots\}, \\ A^{k-1} + A_c^{k-1}, & k \notin J. \end{cases}$$

Построение последовательности $\{X^k\}$ заканчивается в точке X^k , для которой $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$, где ε_1 – заданное число, или при $k \leq M$ (M – предельное число итераций), или при двукратном выполнении двух неравенств $\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2$, $|f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2$, где ε_2 – малое положительное число.

Алгоритм

Шаг 1. Задать X^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число итераций M . Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(X)$.

Шаг 2. Положить $k=0$, $A^0=E$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(X^k)$

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$:

а) если критерий выполнен, то $X^* = X^k$;

б) иначе перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение равенства $k \geq M$:

а) если неравенство выполнено, то $X^* = X^k$ и расчет закончен.

б) иначе перейти при $k=0$ перейти к шагу 10, а при $k \geq 1$ перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить $\Delta g^k = \nabla f(X^{k+1}) - \nabla f(X^k)$.

Шаг 7. Вычислить $\Delta X^k = X^{k+1} - X^k$.

Шаг 8. Вычислить $A_c^k = \frac{\Delta X^k (\Delta X^k)^T}{(\Delta X^k)^T \Delta g^k} - \frac{A^k \Delta g^k (\Delta g^k)^T A^k}{(\Delta g^k)^T A^k \Delta g^k}$.

Шаг 9. Вычислить $A^{k+1} = A^k + A_c^k$.

Шаг 10. Определить $S^k = -A^k \nabla f(X^k)$.

Шаг 11. Вычислить величину α^k в соотношении $X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k$ на основе метода полиномиальной аппроксимации, положив $\alpha^k_{i=0} = 0$, $\Delta \alpha = 0,1$.

Шаг 12. Вычислить $X^{k+1} = X^k + \alpha^k S^k$.

Шаг 13. Проверить выполнение условий:

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2:$$

а) если оба неравенства выполняются в двух последовательных итерациях с номерами k и $k-1$, то расчет окончен и $X^* = X^k$;

б) в противном случае положить $k=k+1$ и перейти к шагу 3.

Пример 6. Найти локальный минимум функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$ на основе Д-Ф-П метода. Выполнять вычисления, пока не будет выполнен хотя бы один из критериев окончания расчетов.

1. Зададим X^0 , ε_1 , ε_2 , M : $X^0 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \end{bmatrix}$, $\varepsilon_1 = 0,1$; $\varepsilon_2 = 0,15$; $M = 10$. Найдем гра-

диент функции в произвольной точке $\nabla f(X) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$.

2. Положим $k=0$, $A^0 = E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

3⁰. Вычислим $\nabla f(X^0)$: $\nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix}$.

4⁰. Проверим выполнение условия $\|\nabla f(X^0)\| < \varepsilon_1$: $\|\nabla f(X^0)\| = 3,9 > 0,1$.

5⁰. Проверим выполнение условия $k \geq M$: $k=0 < 10=M$, переходим к шагу 10.

10⁰. Определим $S^0 = -A^0 \nabla f(X^0)$:

$$S^0 = -A^0 \nabla f(X^0) = -E \nabla f(X^0) = -\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot (3; 2,5)^T = -(3; 2,5)^T$$

11⁰. Вычислим α^0 на основе метода квадратичной аппроксимации: $\alpha^0 = 0,24$.
 Подробное описание вычислений приведено в примере 4, пункт 6⁰.

12⁰. Вычислим

$$X^1 = X^0 + \alpha^0 S^0 = \begin{pmatrix} x_1^1 = 0,5 + 0,24 \cdot (-3) \\ x_2^1 = 1 + 0,24 \cdot (-2,5) \end{pmatrix} = (-0,22; 0,4)^T$$

13⁰. Проверим условия

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2:$$

$$\|X^1 - X^0\| = 0,94 > 0,15,$$

$$|f(X^1) - f(X^0)| = |0,17 - 2| = 1,83 > 0,15.$$

Полагаем $k=k+1=1$ и переходим к шагу 3.

$$3^1. \text{ Вычислим } \nabla f(X^1): \nabla f(X^1) = \begin{bmatrix} -0,48 \\ 0,58 \end{bmatrix}.$$

$$4^1. \text{ Проверим условие } \|\nabla f(X^1)\| < \varepsilon_1: \|\nabla f(X^1)\| = 0,75 > 0,1.$$

$$5^1. \text{ Проверим условие } k \geq M: k=1 < 10=M, \text{ переходим к шагу 6.}$$

$$6^0. \text{ Вычислим } \Delta g^0 = \nabla f(X^1) - \nabla f(X^0): \Delta g^0 = \begin{bmatrix} -3,48 \\ -1,92 \end{bmatrix}.$$

$$7^0. \text{ Вычислим } \Delta X^0 = X^1 - X^0: \Delta X^0 = \begin{bmatrix} -0,72 \\ -0,6 \end{bmatrix}$$

$$8^0. \text{ Вычислим } A_c^0 = \frac{\Delta X^0 (\Delta X^0)^T}{(\Delta X^0)^T \Delta g^0} - \frac{A^0 \Delta g^0 (\Delta g^0)^T A^0}{(\Delta g^0)^T A^0 \Delta g^0}:$$

$$A_c^0 = \frac{\begin{bmatrix} -0,72 \\ -0,6 \end{bmatrix} \cdot (-0,72; -0,6)}{(-0,72; -0,6) \cdot \begin{bmatrix} -3,48 \\ -1,92 \end{bmatrix}} - \frac{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -3,48 \\ -1,92 \end{bmatrix} \cdot (-3,48; -1,92) \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}{(-3,48; -1,92) \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -3,48 \\ -1,92 \end{bmatrix}} = \begin{bmatrix} -0,625 & -0,305 \\ -0,305 & -0,134 \end{bmatrix}$$

$$9^0. \text{ Вычислим } A^1 = A^0 + A_c^0: A^1 = \begin{bmatrix} 0,375 & -0,305 \\ -0,305 & 0,866 \end{bmatrix}.$$

$$10^1. \text{ Определим } S^1 = -A^1 \nabla f(X^1): S^1 = -\begin{bmatrix} 0,356 \\ -0,648 \end{bmatrix}.$$

$$11^1. \text{ Вычислим } \alpha^1 \text{ на основе метода квадратичной аппроксимации: } \alpha^1 = 0,618.$$

$$12^1. \text{ Вычислим}$$

$$X^2 = X^1 + \alpha^1 S^1 = \begin{pmatrix} x_1^2 = -0,22 + 0,618 \cdot (-0,356) \\ x_2^2 = 0,4 + 0,618 \cdot (-0,648) \end{pmatrix} = (0,000; 0,000)^T$$

$$13^1. \text{ Проверим условия}$$

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2:$$

$$\begin{aligned}\|X^1 - X^0\| &= 0,45 > 0,15, \\ |f(X^1) - f(X^0)| &= |0,17 - 2| = 1,7 > 0,15.\end{aligned}$$

Полагаем $k=k+1=2$ и переходим к шагу 3.

$$3^2. \text{ Вычислим } \nabla f(X^2): \nabla f(X^2) = \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,000 \end{bmatrix}.$$

$$4^2. \text{ Проверим условие } \|\nabla f(X^2)\| < \varepsilon_1: \|\nabla f(X^2)\| = 0 < 0,1.$$

Расчет окончен в точке $X^2 = (0; 0)^T$. Эта точка является минимумом рассматриваемой функции.

5 МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА. МЕТОД НЬЮТОНА.

Пусть дана функция $f(X)$, ограниченная снизу на множестве $\mathfrak{R}^n$ и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти безусловный минимум функции $f(X)$ на множестве допустимых решений, то есть найти такую точку $X^* \in \mathfrak{R}^n$, что

$$f(X^*) = \min_{X \in \mathfrak{R}^n} f(X).$$

Стратегия поиска

Стратегия метода Ньютона состоит в построении последовательности точек $\{X^k\}$, $k=0, 1, \dots$, таких что, $f(X^{k+1}) < f(X^k)$, $k=0, 1, \dots$. Точки последовательности $\{X^k\}$ вычисляются по правилу [4,5]:

$$X^{k+1} = X^k + S^k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.1)$$

где X^0 — задается пользователем, а направление спуска S^k определяется для каждого значения k по формуле

$$S^k = -H^{-1}(X^k) \nabla f(X^k). \quad (5.2)$$

Выбор S^k по формуле (5.2) гарантирует выполнения требования $f(X^{k+1}) < f(X^k)$ при условии, что $H(X^k) > 0$. Формула (5.2) получена из следующих соображений.

Для определения направления убывания значений функции $f(X)$ и величины шага вдоль выбранного направления метод Ньютона использует информацию о вторых частных производных функции. Разложим функцию $f(X)$ в ряд Тэйлора в окрестности точки X^k :

$$f(X) = f(X^k) + \nabla f(X^k)^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T \nabla^2 f(X^k) \Delta X + O_3(\Delta X) \quad (5.3)$$

В разложении функции $f(X)$ (5.3) отбросим все члены третьего порядка и выше:

$$F^k = f(X^k) + \nabla f(X^k)^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T \nabla^2 f(X^k) \Delta X \quad (5.4)$$

Функция F^k представляет собой квадратичную функцию, аппроксимирующую заданную функцию $f(X)$ в точке X^k . Минимум функции F^k является оценкой минимума функции $f(X)$. Определим величину ΔX , при которой аппроксимирующая функция F^k достигнет минимального значения. В соответствии с необходимым условием существования экстремума имеем:

$$\frac{dF^k}{d\Delta X} = 0. \quad (5.5)$$

Подставив (5.4) в уравнение (5.5), получим

$$\nabla f(X^k) + \nabla^2 f(X^k) \Delta X = 0. \quad (5.6)$$

Решая (5.6) относительно ΔX , получим оценку минимума функции $f(X)$:

$$\Delta X = -(\nabla^2 f(X^k))^{-1} \nabla f(X^k) = -H^{-1}(X^k) \nabla f(X^k),$$

где $H(X^k)$ – матрица Гессе, вычисленная в точке X^k .

Для квадратичных функций метод Ньютона сходится за одну итерацию, для неквадратичных функций сходимость метода определяется точностью решения задачи.

Построение последовательности $\{X^k\}$ заканчивается в точке X^k , для которой $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$, где ε_1 – заданное число, или при $k \leq M$ (M – предельное число итераций), или при двукратном выполнении двух неравенств $\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2$, $|f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2$, где ε_2 – малое положительное число.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку X^0 , $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число итераций M . Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(X)$ и матрицу Гессе $H(X)$.

Шаг 2. Положить $k=0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(X^k)$

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon_1$:

а) если критерий выполнен, то $X^* = X^k$;

б) иначе перейти к *шагу 5*.

Шаг 5. Проверить выполнение равенства $k \geq M$:

а) если неравенство выполнено, то $X^* = X^k$;

б) иначе перейти к *шагу 6*.

Шаг 6. Определить матрицу Гессе $H(X^k)$.

Шаг 7. Определить матрицу, обратную матрице Гессе $H^{-1}(X^k)$.

Шаг 8. Определить $S^k = -H^{-1}(X^k) \nabla f(X^k)$.

Шаг 9. Определить точку $X^{k+1} = X^k + S^k$.

Шаг 10. Проверить выполнение условий:

$$\|X^{k+1} - X^k\| < \varepsilon_2, \quad |f(X^{k+1}) - f(X^k)| < \varepsilon_2:$$

а) если оба неравенства выполняются в двух последовательных итерациях с номерами k и $k-1$, то расчет окончен и $X^* = X^k$;

б) в противном случае положить $k=k+1$ и перейти к *шагу 3*.

Пример 7. Определить минимум функции $f(X) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2$. Выполнять вычисления, пока не будет выполнен хотя бы один из критериев окончания расчетов.

1. Зададим $X^0 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \end{bmatrix}$, $\varepsilon_1 = 0,1$, $\varepsilon_2 = 0,15$, $M = 10$.

Вычислим градиент функции в произвольной точке $\nabla f(X) = \begin{bmatrix} 4x_1 + x_2 \\ x_1 + 2x_2 \end{bmatrix}$ и

матрицу Гессе $H(X) = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$.

2. Положим $k=0$.

3⁰. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^0) = \begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix}$.

4⁰. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^0)\| = 3,9 > 0,1$. Перейти к *шагу 5*.

5⁰. Проверим условие $k=0 < 10$, перейти к *шагу 6*.

6⁰. Определим матрицу Гессе: $H(X^0) = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$.

7⁰. Определим матрицу, обратную матрице Гессе:

$$\det H = 8 - 1 = 7;$$

$$H^{-1}(X) = \frac{1}{7} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2857 & -0,1429 \\ -0,1429 & 0,5714 \end{bmatrix}.$$

8⁰. Вычислим

$$S^0 = -H^{-1}(X^0) \nabla f(X^0) = - \begin{bmatrix} 0,2857 & -0,1429 \\ -0,1429 & 0,5714 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 \\ 2,5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,5 \\ -1 \end{bmatrix}$$

9⁰. Вычислим $X^1 = X^0 + S^0 = \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0,5 \\ -1 \end{bmatrix}.$

10⁰. Вычислим $\|X^1 - X^0\| = 1,12 > 0,15.$

Вычислим $|f(X^1) - f(X^0)| = 2 > 0,15.$ Полагаем $k=k+1=1$ и переходим к шагу 3.

3¹. Вычислим $\nabla f(X^k) = \nabla f(X^1) = (0; 0)^T.$

4¹. Вычислим $\|\nabla f(X^k)\| = \|\nabla f(X^1)\| = 0 < 0,1.$

Точка $X^1 = (0, 0)^T$ является точкой минимума функции. Так как рассматриваемая функция является квадратичной, вычислительный процесс сходится за одну итерацию.

6. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ К РАЗДЕЛУ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ»

Определить локальный экстремум функции $f(X) = ax_1^2 + bx_2^2 + cx_1x_2 + dx_1 + ex_2$ на основе методов многопараметрической оптимизации. Параметры функции и начальная точка поиска X^0 приведены в Приложении А.

Вариант для выполнения индивидуального задания выбирается соответственно номеру студента в списке группы.

7. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЗАДАНИЯ

1. Определить координаты и характер экстремума функции, используя необходимые и достаточные условия существования экстремума.

2. Определить локальный экстремум функции, используя по выбору программы Mathcad, Matlab, Excel. Построить линии равного уровня в окрестности точки экстремума.

3. Определить экстремум функции методами 0-го порядка (прямого поиска) на основе трех итераций:

а) методом Хука - Дживса (для нечетных вариантов);

б) методом поиска по симплексу (для четных вариантов).

4. Определить экстремум функции методами 1-го порядка (градиентными) на основе трех итераций:

а) методом Коши (на оценку «удовлетворительно»);

б) методом Флетчера - Ривса (на оценку «хорошо»);

в) Д-Ф-П методом (на оценку «отлично»).

5. Определить экстремум функции методом Ньютона (2-й порядок) на основе трех итераций.

8. СОДЕРЖАНИЕ ОТЧЕТА О ВЫПОЛНЕНИИ ИНДИВИДУАЛЬНОГО ЗАДАНИЯ

1. Постановка задачи.

2. Результаты аналитического решения задачи оптимизации.

3. Результаты решения задачи оптимизации в выбранных программных средах.

4. Графическая интерпретация решения.

5. Последовательность вычислений на основе заданных методов.

6. Анализ результатов и выводы.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Ашманов, С. А. Теория оптимизации в задачах и упражнениях : учебное пособие / С. А. Ашманов, А. В. Тимохов. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2012. — 448 с. — ISBN 978-5-8114-1366-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/3799>
2. Болотский, А. В. Исследование операций и методы оптимизации : учебное пособие / А. В. Болотский, О. А. Кочеткова. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 116 с. — ISBN 978-5-8114-4568-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/136175>
3. Исследование операций в задачах программной инженерии : учебное пособие / Н. А. Соловьев, Е. Н. Чернопрудова, Н. А. Тишина, А. Ф. Валеев. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 164 с. — ISBN 978-5-8114-3770-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/121486>
4. Лесин, В. В. Основы методов оптимизации : учебное пособие / В. В. Лесин, Ю. П. Лисовец. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2016. — 344 с. — ISBN 978-5-8114-1217-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/86017>
5. Пантелеев, А. В. Методы оптимизации в примерах и задачах : учебное пособие / А. В. Пантелеев, Т. А. Летова. — 4-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2015. — 512 с. — ISBN 978-5-8114-1887-9. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/67460>
6. Методические указания к выполнению лабораторной работы № 7 «Методы однопараметрической оптимизации» по дисциплине «Прикладная математика» для студентов направления 09.03.01 «Информатика и вычислительная техника» очной формы обучения/ Сост.: И.А. Балакирева, А.В. Скатков – Севастополь, 2021. – 25 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

№ вари- анта	a	b	c	d	e	X^0	
						x_1^0	x_2^0
1	7	5	3	6	5	2	2
2	2	2	4	8	7	2	2
3	6	3	6	4	5	1	1
4	9	4	7	6	8	3	2
5	1	6	4	3	2	0	-1
6	9	9	8	6	3	2	3
7	3	9	4	7	2	2	3
8	1	3	1	5	3	1	3
9	4	9	8	8	4	1	3
10	3	3	5	4	6	2	3
11	8	8	2	4	8	2	3
12	8	2	8	6	9	4	-2
13	7	6	1	8	6	-3	-3
14	5	2	4	6	8	3	1
15	6	3	6	2	4	3	2
16	6	3	5	5	7	3	2
17	8	7	5	4	9	3	2
18	6	7	2	5	8	3	2
19	8	7	6	6	5	3	2
20	7	7	6	3	3	3	2
21	2	4	5	4	4	3	2
22	4	6	5	3	7	3	2
23	3	4	6	3	4	4	1
24	3	6	7	9	9	2	3
25	7	4	4	2	6	2	3
26	2	8	1	4	7	2	3
27	3	6	4	6	9	2	3
28	2	4	5	4	6	2	-1
29	6	6	9	6	6	2	2
30	2	6	5	6	7	2	3

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ
ОДНОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ
ФУНКЦИЙ НЕСКОЛЬКИХ ПЕРЕМЕННЫХ**

Методические указания

*Составители : Балакирева Ирина Аркадьевна,
Скатков Александр Владимирович*

В авторской редакции

Изд. № 189/2022. Объем 2,5 п.л. Усл. печ. л. 2,32. Уч.-изд. л. 2,45.
РИИЦМ ФГАОУ ВО «Севастопольский государственный университет»