

Лабораторная работа № 9

Численное решение задач оптимизации

Цель работы: получение практических навыков построения алгоритмов решения задач оптимизации, их программной реализации на компьютере, оценки погрешности решения, сравнение эффективности различных методов.

Краткие теоретические сведения

Под задачей оптимизации понимают определение минимума (и соответствующих аргументов) действительной функции $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ от n действительных переменных в области D n -мерного пространства. Функцию $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ называют целевой функцией. Целевую функцию можно представить в векторной форме: $f(\mathbf{X})$, где $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ -вектор аргументов целевой функции.

Если \mathbf{X} – одномерный вектор (скаляр), то задачу оптимизации называют одномерной. При $n > 1$ говорят о многомерной (многокритериальной) оптимизации.

Если D совпадает со всем n -мерным пространством, то задачу оптимизации называют безусловной. В противном случае задача имеет ограничения, определяющие область D . Обычно D определяется совокупностью нелинейных функций, удовлетворяющих уравнениям или неравенствам. Задачу оптимизации в таком случае называют условной.

Пусть функция $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ непрерывно дифференцируема в области D . Пусть известно, что в D существует точка $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Тогда в этой точке с необходимостью должны выполняться соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ \frac{\partial}{\partial x_2} f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned} \tag{1}$$

Решение системы (1) позволяет определить неизвестные экспериментальные точки. Затем, используя достаточные условия минимума, следует выделить те точки области D , в которых достигается локальный минимум. Затем, сравнив значения целевой функции в точках локального минимума, надо выбрать точку с минимальной величиной локального минимума, то есть определить глобальный минимум $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ в области D . Однако надежные и одновременно экономичные методы поиска глобального минимума в настоящее время неизвестны.

Необходимое условие экстремума (1) — условие стационарности может быть также записано в форме:

$$\nabla f(\mathbf{X}) = 0, \tag{2}$$

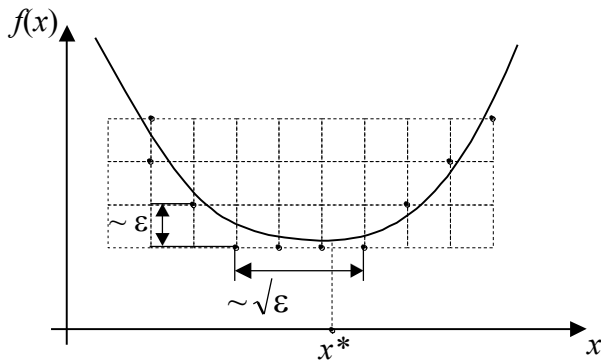
где $\nabla f(\mathbf{X}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{X})}{\partial x_n} \right]^T$ — градиент целевой функции в точке

$$\mathbf{X} = x_1, x_2, \dots, x_n^T.$$

Рассмотрим вопрос о максимально достижимой точности при решении задач оптимизации. Пусть x^* — точка минимума функции $f(x)$. Разложим в окрестности этой точки функцию $f(x)$ в ряд Тейлора и учтем, что в точке минимума $f'(x^*) = 0$. Тогда

$$f(x^* + \Delta x) = f(x^*) + \Delta x f'(x^*) + \Delta x^2 \frac{f''(x^*)}{2} + \dots \approx f(x^*) + c \Delta x^2,$$

где $c = \frac{f''(x^*)}{2}$.



Откуда следует, что для того чтобы отклонения функции $f(x)$ от значения в стационарной точке $f(x^*)$ были заметными, необходимо, чтобы:

$$\Delta x \sim \sqrt{\varepsilon}, \quad (3)$$

где ε — относительная погрешность округления вещественных чисел. Таким образом, если нелинейное уравнение $f(x)=0$ можно решить с относительной точностью ε , то задачу $\min\{f(x)\}$ только с относительной точностью $\sqrt{\varepsilon}$.

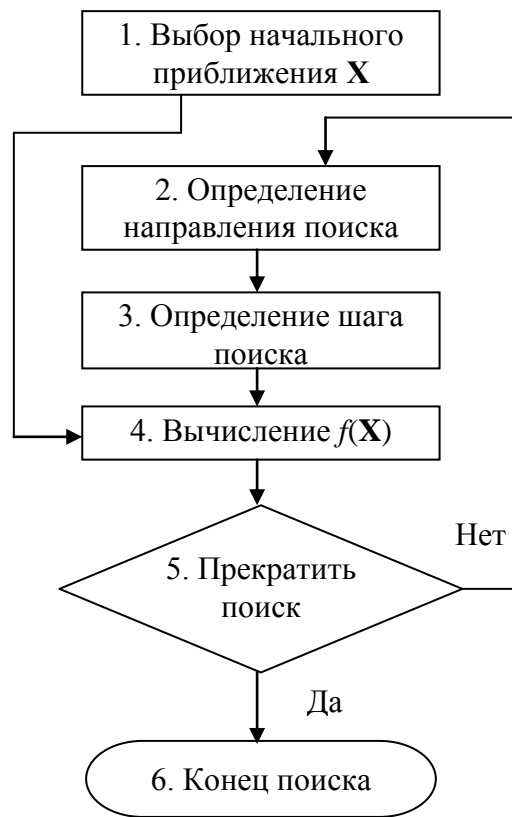
Наиболее многочисленную группу методов решения задач оптимизации составляют локальные методы безусловной оптимизации. Некоторое представление о широко применяемых методах этой группы дает рисунок ниже.



В зависимости от порядка используемых производных целевой функции методы безусловной оптимизации делят на методы нулевого, первого и второго порядков.

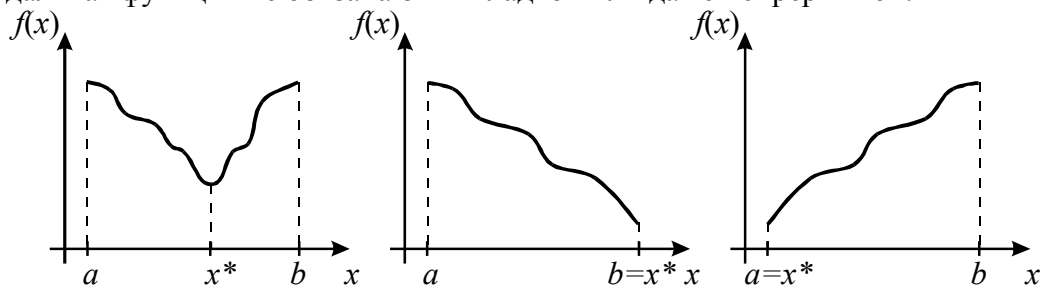
Практически все методы оптимизации стремятся построить такую последовательность значений X_0, X_1, X_2, \dots , при которой $f(X_0) > f(X_1) > f(X_2) > \dots$. В этом случае метод обеспечивает сходимость и можно надеяться, что минимум функции будет найден.

Схема алгоритма поиска для общего случая показана на рис. Сущность метода оптимизации определяется этапами 2 и 3 алгоритма, на которых выбирается направление дальнейшего поиска и вычисляется координаты очередной точки X_{i+1} на траектории поиска.



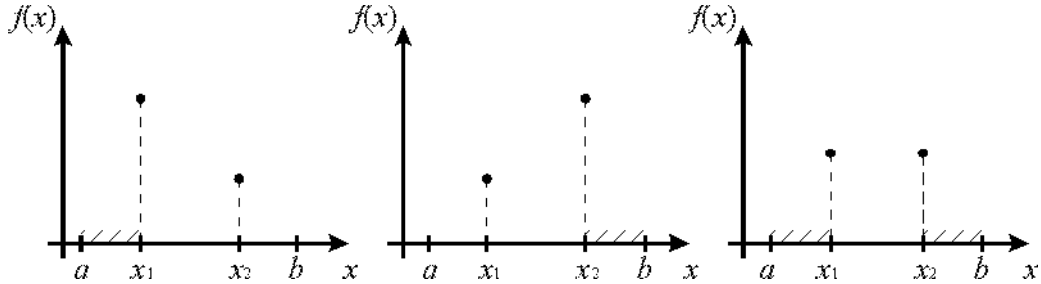
Методы одномерного поиска, в основном, строят исходя из предположения унимодальности целевой функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$. Действительную функцию $f(x)$ называют унимодальной, если существует единственная точка минимума x^* , и что $f(x)$ строго убывает для $x \leq x^*$ и строго возрастает для $x \geq x^*$.

Примеры унимодальных функций показаны на рисунке ниже. Заметим, что унимодальная функция не обязана быть гладкой или даже непрерывной.



Методы одномерного поиска можно разделить на методы последовательного поиска (метод дихотомии, Фибоначчи и золотого сечения) и методы, использующие аппроксимацию функции (методы квадратичной и кубической интерполяции).

Рассмотрим методы последовательного поиска. Пусть известно, что $f(x)$ унимодальна на $[a, b]$. Тогда по любым двум значениям $f(x_1), f(x_2)$ можно указать интервал, в котором находится точка x^* , минимизирующая $f(x)$, причем этот интервал имеет длину меньшую первоначальной. Пусть $x_1 < x_2$. Возможны следующие три варианта:



В первом случае следует отбросить интервал $[a, x_1]$, во втором случае $[x_2, b]$, в третьем $[a, x_1], [x_2, b]$, поскольку в этих интервалах не может находиться x^* , в противном случае нарушается предположение об унимодальности $f(x)$. Задача состоит в том, чтобы найти множество абсцисс x_1, x_2, \dots, x_n , в которых вычисляется функция, такое, что минимум функции $f(x)$ лежит в некотором интервале $x^* \in [x_{i-1}, x_i]$. Такой интервал называют интервалом неопределенности.

Стратегия выбора значений x_{i-1} и x_i для проведения опытов с учетом предыдущих результатов определяет сущность различных методов последовательного поиска.

В методе дихотомии (половинного деления) на каждом шаге аргументы x_1 и x_2 выбираются на расстоянии $\delta/2$ справа и слева от середины интервала:

$$x_1 = \frac{a+b}{2} - \frac{\delta}{2}, \quad x_2 = \frac{a+b}{2} + \frac{\delta}{2}.$$

Вычисляя $f(x_1)$ и $f(x_2)$ находят новый интервал неопределенности:

- если $f(x_1) < f(x_2)$, то $b=x_2$;
- если $f(x_1) = f(x_2)$, то $a=x_1, b=x_2$;
- если $f(x_1) > f(x_2)$, то $a=x_1$.

Затем снова вычисляют x_1 и x_2 и продолжают поиск. Поиск прекращают, когда длина интервала неопределенности $|b-a|$ меньше заданной погрешности определения x^* .

Золотое сечение, открытое Евклидом, состоит в разбиении интервала $[a, b]$ точкой x_1 на две части таким образом, чтобы отношение длины всего интервала к большей части было равно отношению большей части к меньшей:

$$\frac{b-a}{b-x_1} = \frac{b-x_1}{x_1-a}.$$

Легко проверить, что золотое сечение производят две точки:

$$x_1 = a + (1 - \delta)(b - a), \\ x_2 = a + \delta(b - a),$$

где $\delta = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.618$.

Точка x_1 производит золотое сечение отрезка $[a, x_2]$, а точка x_1 интервала $[x_1, b]$. Поэтому на оставшемся интервале нужно определить только одну точку, производящую золотое сечение. На каждом шаге длина первого интервала неопределенности равна ≈ 0.618 длины старого интервала.

Алгоритм метода золотого сечения состоит из следующих шагов:

1. Вычислить

$$x_1 := a + (1 - \delta)(b - a)$$

$$x_2 := a + \delta(b - a).$$
2. Вычислить $f(x_1), f(x_2)$.
3. Если $f(x_1) < f(x_2)$, то положить $b := x_2, x_2 := x_1, f(x_2) := f(x_1), x_1 := a + (1 - \delta)(b - a)$ и вычислить $f(x_1)$
иначе положить $a := x_1, x_1 := x_2, f(x_1) := f(x_2), x_2 := a + \delta(b - a)$ и вычислить $f(x_2)$
4. Если $|b - a| > \varepsilon \left| \frac{b + a}{2} \right|$, то перейти к шагу 3
иначе $x^* \approx \frac{b + a}{2}$.

Из методов, использующих аппроксимацию функции, рассмотрим алгоритм метода квадратичной интерполяции:

1. Вычислить $f(x)$ в начальной точке x_0 .
2. Выбрать шаг h . Если $f(x_0 + h) > f(x_0)$, то $h := -h$.
3. Вычислить $x_{i+1} = x_i + h$ и $f(x_{i+1})$.
4. Если $f(x_{i+1}) \leq f(x_i)$, то $h := 2h$ и перейти к этапу 3.
Если $f(x_{i+1}) > f(x_i)$, то $x_m := x_{i+1}, x_{m-1} := x_i, h := h/2$ и перейти к этапу 3 в последний раз.
5. Из четырех равноотстоящих значений $x_{m+1}, x_m, x_{m-1}, x_{m-2}$ исключить либо x_{m+1} , либо x_{m-2} , в зависимости от того, какая из этих точек находится дальше от точки x , в которой $f(x)$ имеет наименьшее значение. Пусть x_a, x_b, x_c — оставшиеся три точки, где x_c — центральная точка, а $x_a = x_c - h, x_b = x_c + h$.
6. Провести квадратичную интерполяцию для определения координат точки:

$$x^* = x_c + \frac{h(f(x_a) - f(x_b))}{2(f(x_a) - 2f(x_c) + f(x_b))}.$$

К методам первого порядка относят градиентные методы. Известно, что градиент ортогонален к поверхности уровня целевой функции в точке его определения и это направление совпадает с направлением наибо́льшего возрастания целевой функции.

Все градиентные методы используют указанные особенности поведения градиента, а их стратегия поиска строится на рекуррентном выражении вида:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + h\mathbf{S}_i,$$

где h — величина шага, а \mathbf{S}_i — единичный вектор направления поиска на i -м шаге.

Сущность численного метода определяется способом выбора шага и направления поиска.

При поиске минимума целевой функции нужно двигаться в направлении, противоположном градиенту $f(\mathbf{X})$. Поэтому направление:

$$\mathbf{S}_i = -\frac{\nabla f(\mathbf{X}_i)}{\|\nabla f(\mathbf{X}_i)\|_2}.$$

позволяет получить следующую рекуррентную формулу для метода градиентного спуска:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i - h \frac{\nabla f(\mathbf{X}_i)}{\|\nabla f(\mathbf{X}_i)\|_2}. \quad (4)$$

Особенностью метода наискорейшего спуска является движение с оптимальным шагом, рассчитанным с помощью одномерной минимизации целевой функции по h вдоль антиградиентного направления. Действительно, если в какой либо точке \mathbf{X}_i

направление поиска определено, то значение целевой функции в следующей точке \mathbf{X}_{i+1} оказывается функцией только шага спуска:

$$f(\mathbf{X}_{i+1}) = f\left(\mathbf{X}_i - h \frac{\nabla f(\mathbf{X}_i)}{\|\nabla f(\mathbf{X}_i)\|_2}\right) = g(h).$$

Поэтому шаг h можно выбрать так, чтобы $f(\mathbf{X}_{i+1})$ максимально уменьшила свое значение:

$$f(\mathbf{X}_{i+1}) = \min_h f\left(\mathbf{X}_i - h \frac{\nabla f(\mathbf{X}_i)}{\|\nabla f(\mathbf{X}_i)\|_2}\right) = \min_h g(h).$$

При этом выбор оптимального шага сводится к решению одномерной оптимизации функции $f(h)$. Алгоритм метода наискорейшего спуска содержит следующие элементы:

1. Вычисление всех частных производных целевой функции.
2. Нахождение одним из методов одномерного поиска оптимального шага вдоль антиградиентного направления. Величина шага h определяется из условия минимума функции $f\left(\mathbf{X}_i - h \frac{\nabla f(\mathbf{X}_i)}{\|\nabla f(\mathbf{X}_i)\|_2}\right)$ по h .
3. Вычисление координат новой точки \mathbf{X}_{i+1} по формуле (4).
4. Если условие прекращения поиска не выполняется, то переход к шагу 1.

Траектория поиска этим методом показана на рисунке. Из рисунка видно, что движение вдоль одного направления прекращается, когда линия направления поиска становится касательной к какой либо линии равного уровня. Каждое новое направление движения к экстремуму ортогонально предшествующему, если целевая функция квадратична.

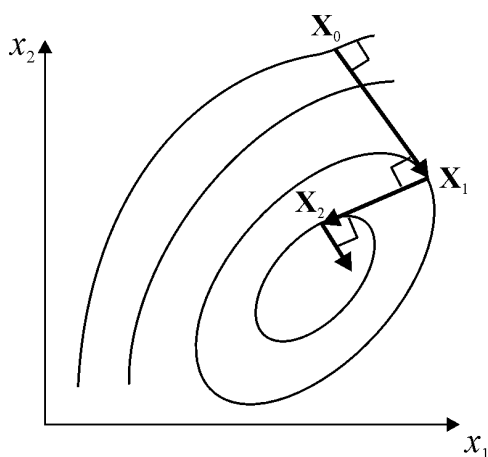


Рис. Иллюстрация метода наискорейшего спуска

Рассмотренные методы сходятся к локальному минимуму со скоростью геометрической прогрессии, т.е. линейно.

Рассмотрим метод сопряженных градиентов. Векторы \mathbf{A} и \mathbf{B} называют сопряженными по отношению к матрице \mathbf{Q} (или \mathbf{Q} -сопряженными), если скалярное произведение векторов \mathbf{A} и \mathbf{QB} равно нулю, т.е. $\mathbf{A}^T \mathbf{QB} = 0$. Сопряженность векторов является обобщением понятия ортогональности, так как если $\mathbf{Q}=\mathbf{E}$, то \mathbf{Q} -сопряженность векторов означает их ортогональность.

Предположим, что поиск начинается в точке \mathbf{X}_0 с начальным направлением \mathbf{S}_0 , выбранным произвольно. Тогда новая точка:

$$\mathbf{X}_1 = \mathbf{X}_0 + h\mathbf{S}_0, \quad (5)$$

где величину шага h следует определять из условия минимума функции $f(\mathbf{X}_0 + h\mathbf{S}_0)$ по h . Для этого разложим функцию $f(\mathbf{X})$ в ряд Тейлора в окрестности точки $\mathbf{X} = \mathbf{X}_0$ и ограничимся рассмотрением только трех членов, что является точным для квадратичной целевой функции:

$$f(\mathbf{X}) \approx f(\mathbf{X}_0) + \nabla f(\mathbf{X}_0)^T (\mathbf{X} - \mathbf{X}_0) + \frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{X}_0)^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_0) (\mathbf{X} - \mathbf{X}_0),$$

где $\mathbf{H}(\mathbf{X}_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_2 \partial x_n} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{X}_0)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$ — матрица Гессе.

Тогда:

$$f(\mathbf{X}_0 + h\mathbf{S}_0) = f(\mathbf{X}_0) + \nabla f(\mathbf{X}_0)^T h\mathbf{S}_0 + \frac{1}{2} h\mathbf{S}_0^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_0) h\mathbf{S}_0.$$

Из условия минимума последней функции по h имеем:

$$\frac{df(\mathbf{X}_0 + h\mathbf{S}_0)}{dh} = \nabla f(\mathbf{X}_0)^T \mathbf{S}_0 + h\mathbf{S}_0^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_0) \mathbf{S}_0 = 0.$$

Откуда

$$h_0 = -\frac{\nabla f(\mathbf{X}_0)^T \mathbf{S}_0}{\mathbf{S}_0^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_0) \mathbf{S}_0}. \quad (6)$$

Можно показать, что после того как по (5) и (6) вычислена точка \mathbf{X}_1 , для продолжения поиска должно быть выбрано новое направление \mathbf{S}_1 , так, чтобы

$$\mathbf{S}_1^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_0) \mathbf{S}_0 = 0,$$

т.е. новое направление \mathbf{S}_1 должно быть сопряженным к старому направлению \mathbf{S}_0 . Сходимость такого метода строго обоснована для квадратичных функций вида:

$$f(\mathbf{X}) = \mathbf{C}^T \mathbf{X} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X},$$

где \mathbf{C} — вектор-столбец постоянных коэффициентов, \mathbf{H} — матрица постоянных коэффициентов. Минимизация такой функции при положительно-определенной матрице \mathbf{H} может быть выполнена за n (или меньше) шагов. В общем случае целевые функции не являются квадратичными. Поэтому с использованием такого метода решение будет найдено за большее число шагов, чем n . Недостаток такого метода — необходимость трудоемкого расчета матрицы Гессе. Этот недостаток устранен в модифицированном Р. Флетчером и Ц.М. Ривсом варианте, называемом методом сопряженного градиента.

В методе сопряженных градиентов строится последовательность направлений поиска \mathbf{S}_i , которые являются линейными комбинациями антиградиента $-\nabla f(\mathbf{X}_i)$ и предыдущих направлений поиска $(\mathbf{S}_0, \dots, \mathbf{S}_{i-1})$. Так, если $\mathbf{S}_0 = -\nabla f(\mathbf{X}_0)$, то $\mathbf{X}_1 = h_0 \mathbf{S}_0$ нужно найти новое $\mathbf{S}_1 = -\nabla f(\mathbf{X}_1) + \beta_1 \mathbf{S}_0$ направление, подобрав коэффициент β_1 так,

чтобы \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_0 были сопряженными. β_1 будет удовлетворять условию сопряженности векторов \mathbf{S}_0 и \mathbf{S}_1 если $\beta_1 = \frac{\nabla f(\mathbf{X}_1)^T \nabla f(\mathbf{X}_1)}{\nabla f(\mathbf{X}_0)^T \nabla f(\mathbf{X}_0)}$.

В общем случае алгоритм метода сопряженных градиентов состоит из следующих этапов:

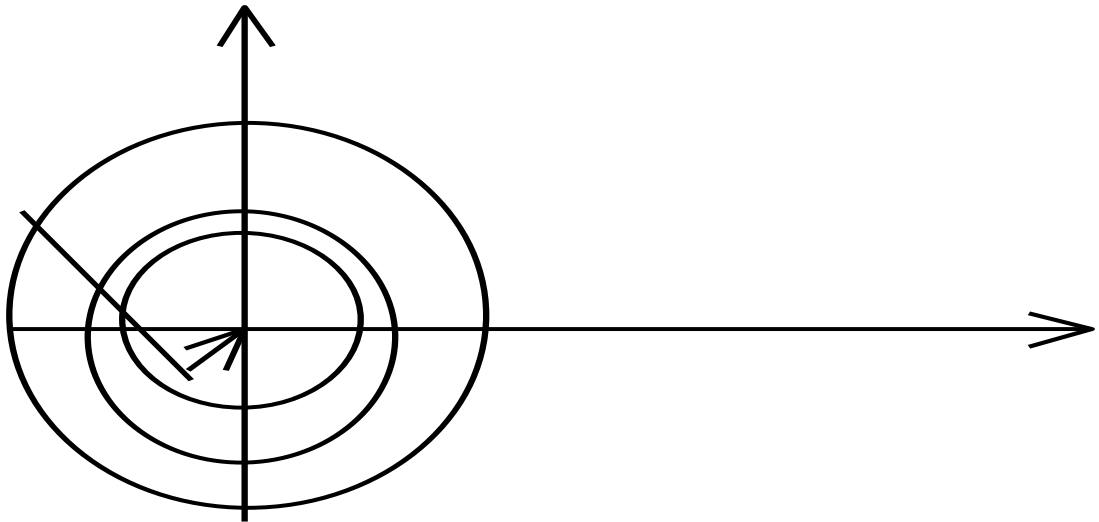
1. Вычисление вектора $\mathbf{S}_0 = -\nabla f(\mathbf{X}_0)$.
2. Нахождение минимума $f(\mathbf{X})$ одним из методов одномерного поиска в направлении \mathbf{S}_i . Откуда находим \mathbf{X}_{i+1} , $f(\mathbf{X}_{i+1})$, $\nabla f(\mathbf{X}_{i+1})$.

3. Определение нового сопряженного направления \mathbf{S}_{i+1} из соотношения:

$$\mathbf{S}_{i+1} = -\nabla f(\mathbf{X}_{i+1}) + \beta_i \frac{\nabla f(\mathbf{X}_{i+1})^T \nabla f(\mathbf{X}_{i+1})}{\nabla f(\mathbf{X}_i)^T \nabla f(\mathbf{X}_i)} \mathbf{S}_i.$$

После вычисления $(n+1)$ -го шага (при $i=n$) вычисления циклически повторяются.

4. Если $\|\mathbf{S}_i\| < \varepsilon$ поиск прекращается.



Методы сопряженных градиентов обладают n -шаговой квадратичной скоростью сходимости, т. е.:

$$\|\mathbf{X}_{i+n} - \mathbf{X}^*\| \leq c \|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}^*\|^2.$$

К методам второго порядка относится метод Ньютона. Пусть \mathbf{X}_i — i -е приближение к точке, соответствующей минимуму функции $f(\mathbf{X})$. В окрестности этой точки разложим функцию $f(\mathbf{X})$ в ряд Тейлора и ограничимся рассмотрением только трех членов. Тогда,

$$f(\mathbf{X}) = f(\mathbf{X}_i) + \nabla f(\mathbf{X}_i)^T (\mathbf{X} - \mathbf{X}_i) + \frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{X}_i)^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_i) (\mathbf{X} - \mathbf{X}_i), \quad (7)$$

где $\mathbf{H}(\mathbf{X}_i)$ — матрица Гессе в точке $\mathbf{X}=\mathbf{X}_i$.

Новое приближение \mathbf{X}_{i+1} найдем из необходимого условия существования минимума функции (7):

$$\nabla f(\mathbf{X}_{i+1}) = \nabla f(\mathbf{X}_i) + \mathbf{H}(\mathbf{X}_i) (\mathbf{X}_{i+1} - \mathbf{X}_i). \quad (8)$$

Откуда

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i - \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{X}_i) \nabla f(\mathbf{X}_i).$$

Формулу (8) можно получить применением метода Ньютона к решению системы нелинейных уравнений $\nabla f(\mathbf{X}) = 0$. Поэтому такой метод называют методом Ньютона решения задачи безусловной минимизации.

При практическом использовании формулы (8) не прибегают к непосредственному обращению матрицы Гессе, а на каждом итерационном шаге задачу решают в два этапа. В начале решают СЛАУ относительно $\Delta \mathbf{X}_i$:

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}_i)\Delta \mathbf{X}_i = -\nabla f(\mathbf{X}_i), \quad (9)$$

а затем находят новое приближение:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i + \Delta \mathbf{X}_i. \quad (10)$$

Если начальное приближение \mathbf{X}_0 задано достаточно близко к точке \mathbf{X}^* , то метод (9), (10) имеет квадратичную скорость сходимости, то есть:

$$\|\mathbf{X}_{i+1} - \mathbf{X}^*\| \leq c \|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}^*\|^2,$$

где c — постоянная величина.

При решении СЛАУ (9) необходимо иметь в виду два важных свойства матрицы Гессе. Во-первых, матрица Гессе является симметричной. Во-вторых, из (7) следует, что если \mathbf{X}_i является точкой минимума, то $\nabla f(\mathbf{X}_i) = 0$ и, следовательно, для того, чтобы функция $f(\mathbf{X})$ возрастала при отклонении от точки \mathbf{X}_i , необходимо чтобы $(\mathbf{X} - \mathbf{X}_i)^T \mathbf{H}(\mathbf{X}_i)(\mathbf{X} - \mathbf{X}_i) > 0$. Следовательно, вблизи минимума матрица Гессе положительно определена. Поэтому для решения СЛАУ (9) применяется разложение Холесского.

Метод Ньютона безусловной минимизации имеет те же недостатки, что и метод Ньютона решения нелинейных уравнений: метод не имеет глобальной сходимости и требует аналитически заданных первых и вторых производных целевой функции. Однако метод Ньютона безусловной оптимизации имеет дополнительный недостаток. Даже будучи локальным, он не всегда приводит к точке минимума, поскольку в нем нет ничего, чтобы удерживало бы его от продвижения в сторону максимума или седловой точки функции $f(\mathbf{X})$, в которых $\nabla f(\mathbf{X})$ тоже равен нулю. Последнее возможно если матрица Гессе перестанет быть положительно определенной. Поэтому в практически используемых методах Ньютона, когда матрица Гессе не является положительно определенной (появляются отрицательные собственные значения) ее заменяют матрицей:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H}(\mathbf{X}_i) + \mu \mathbf{E},$$

в которой μ выбирается так, чтобы матрица $\tilde{\mathbf{H}}$ была положительно определенной и хорошо обусловленной. При этом наименьшее среди возможных μ должно быть несколько больше, чем модуль наименьшего отрицательного собственного значения матрицы Гессе $\mathbf{H}(\mathbf{X}_i)$.

С целью увеличения области сходимости часто применяют модифицированный метод Ньютона, в котором новое приближение \mathbf{X}_{i+1} определяют по формуле:

$$\mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{X}_i - \alpha \tilde{\mathbf{H}}^{-1} \nabla f(\mathbf{X}_i),$$

где $0 < \alpha \leq 1$. Величину α выбирают такой, чтобы обеспечить уменьшение целевой функции, то есть выполнение условия:

$$f(\mathbf{X}_{i+1}) < f(\mathbf{X}_i).$$

Если аналитические выражения для первых и вторых производных целевой функции не могут быть заданы, то для их определения используют конечно-разностную аппроксимацию:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_m(\mathbf{X}_k)}{\partial x_i} &\approx \frac{f_m(\mathbf{X}_k + \mathbf{I}\Delta x_i) - f_m(\mathbf{X}_k)}{\Delta x_i}, \\ \frac{\partial^2 f_m(\mathbf{X}_k)}{\partial x_i^2} &\approx \frac{f_m(\mathbf{X}_k - \mathbf{I}\Delta x_i) - 2f_m(\mathbf{X}_k) + f_m(\mathbf{X}_k + \mathbf{I}\Delta x_i)}{\Delta x_i^2}, \\ \frac{\partial^2 f_m(\mathbf{X}_k)}{\partial x_i \partial x_j} &\approx \frac{f_m(\mathbf{X}_k + \mathbf{I}\Delta x_i + \mathbf{J}\Delta x_j) + f_m(\mathbf{X}_k - \mathbf{I}\Delta x_i - \mathbf{J}\Delta x_j) -}{4\Delta x_i \Delta x_j} - \\ &\quad \frac{f_m(\mathbf{X}_k - \mathbf{I}\Delta x_i + \mathbf{J}\Delta x_j) + f_m(\mathbf{X}_k + \mathbf{I}\Delta x_i - \mathbf{J}\Delta x_j)}{4\Delta x_i \Delta x_j}, \end{aligned}$$

где \mathbf{I} -вектор, i -й элемент которого равен 1, а все остальные элементы равны 0, \mathbf{J} -вектор, j -й элемент которого равен 1, а все остальные элементы равны 0. Для правильного выбора шагов аппроксимации Δx_i , Δx_i , Δx_j необходимо учитывать, что их уменьшение приводит к уменьшению погрешности аппроксимации, но увеличивает вычислительную погрешность. Поэтому на практике их выбирают исходя из разумного компромисса как:

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= \begin{cases} \sqrt{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i, & \sqrt{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i \neq 0 \\ \sqrt{\varepsilon_{\text{маши}}} \text{ type } x_i, & \sqrt{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i = 0 \end{cases}, \quad (5) \\ \Delta x_i &= \begin{cases} \sqrt[4]{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i, & \sqrt[4]{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i \neq 0 \\ \sqrt[4]{\varepsilon_{\text{маши}}} \text{ type } x_i, & \sqrt[4]{\varepsilon_{\text{маши}}} x_i = 0 \end{cases}, \end{aligned}$$

где $\varepsilon_{\text{маши}}$ - относительная погрешность округления вещественных чисел (в языке C для типа float $\varepsilon_{\text{маши}} \approx 1,2 \cdot 10^{-7}$), type x_i - типичное значение переменной x_i .

Основным недостатком метода Ньютона являются громоздкие вычисления матрицы Гессе. В методах переменной метрики (матрицу Гессе можно интерпретировать как метрику в пространстве градиентов) более просто вычисляемой матрицей. Один из способов построения методов переменной метрики основан на применении метода секущих решения нелинейных уравнений применительно к системе $\nabla f(\mathbf{X}) = 0$.

При этом матрица Гессе является матрицей Якоби, построенной для компонентов градиента целевой функции. При использовании метода секущих на каждом итерационном шаге новая матрица Гессе $\tilde{\mathbf{H}}_{i+1}$ пересчитывается на основе предыдущей $\tilde{\mathbf{H}}_i$.

Пусть \mathbf{H}_0 — вычисленная матрица Гессе в начальной точке поиска \mathbf{X}_0 , либо некоторая другая положительно-определенная симметричная матрица, например единичная матрица. Тогда вектор направления $\Delta \mathbf{X}_i$ поиска на i -м шаге и следующая точка траектории могут быть вычислены как:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}}_i \Delta \mathbf{X}_i &= -\nabla f(\mathbf{X}_i), \\ \mathbf{X}_{i+1} &= \mathbf{X}_i + \alpha \Delta \mathbf{X}_i, \end{aligned}$$

где α определяется из условия минимума функции $f(\mathbf{X}_i + \alpha \Delta \mathbf{X}_i)$ вдоль $\Delta \mathbf{X}_i$ одним методов одномерного поиска.

Следующее приближение матрицы $\tilde{\mathbf{H}}$ можно найти из выражения:

$$\tilde{\mathbf{H}}_{i+1} = \tilde{\mathbf{H}}_i + \frac{\alpha \Delta \mathbf{X}_i \Delta \mathbf{X}_i^T}{\Delta \mathbf{X}_i^T \mathbf{P}_i} - \frac{\tilde{\mathbf{H}}_i \mathbf{P}_i \mathbf{P}_i^T \tilde{\mathbf{H}}_i}{\mathbf{P}_i^T \tilde{\mathbf{H}}_i \mathbf{P}_i},$$

где $\mathbf{P}_i = \nabla f(\mathbf{X}_{i+1}) - \nabla f(\mathbf{X}_i)$.

Рабочее задание

1. Построить алгоритмы решения задачи n -мерной оптимизации методами наискорейшего градиентного спуска, сопряженных градиентов, Ньютона и переменной метрики.
2. Составить рабочую программу для решения задачи оптимизации каждым методом с относительной погрешностью $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-4}$. Каждый метод должен быть оформлен в виде отдельной универсальной функции. Формальные параметры функции должны включать: имя функции, реализующей вычисление целевой функции $f(\mathbf{X})$; количество параметров оптимизации n ; относительную погрешность решения; начальное приближение; решение задачи оптимизации. В программе предусмотреть возможность подсчета числа вызовов функций.
3. Набрать и отладить программу на компьютере, используя целевую функцию с известной точкой минимума.
4. Для задачи, выбранной в соответствии с вариантом построить целевую функцию и решить задачу оптимизации разработанными методами. Для каждого метода получить и записать значения и аргументы целевой функций на каждом итерационном шаге алгоритмов.
5. Сравнить различные методы по скорости сходимости, надежности, требуемым машинным ресурсам (объем оперативной памяти, количеству арифметических операций, времени выполнения).

Содержание отчета

1. Название работы.
2. Цель.
3. Электрическую схему, соответствующую варианту, и полученную целевую функцию.
4. Рабочее задание.
5. Математические формулировки используемых алгоритмов решения задачи оптимизации каждым методом.
6. Листинг рабочей программы.
7. Результаты расчетов.
8. Выводы.

Задачи

1.

Варианты заданий

Номер бригады	Номер задачи	Номер варианта задачи
1	2	1
2	3	1
3	4	1
4	5	1
5	6	1
6	7	1
7	1	1
8	2	2
9	3	2
10	4	2
11	5	2
12	6	2
13	7	2
14	1	2
15	3	3
16	4	3