

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до лабораторних робіт з дисципліни
«Комп'ютерні методи інтелектуальної обробки даних»
для студентів спеціальності
8.05010102 «Інформаційні технології проектування»
всіх форм навчання

2016

Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни «Комп'ютерні методи інтелектуальної обробки даних» для студентів спеціальності 8.05010102 «Інформаційні технології проектування» всіх форм навчання / Укладачі: В.І. Дубровін, Л.Ю. Дейнега. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2016. – 30 с.

Укладачі: В.І. Дубровін,
Л. Ю. Дейнега

Рецензент: А.В. Притула

Відповідальний за випуск: В.І. Дубровін

Затверджено на
засіданні кафедри ПЗ
Протокол № 5 від 17.11.16

ЗМІСТ

1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД КОШІ	5
1.1 Короткі теоретичні відомості	5
1.2 Порядок виконання роботи	11
1.3 Зміст звіту	12
1.4 Контрольні питання	12
2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД НЬЮТОНА	13
2.1 Короткі теоретичні відомості	13
2.2 Порядок виконання роботи	15
2.3 Зміст звіту	16
2.4 Контрольні питання	16
3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД НЬЮТОНА	17
3.1 Короткі теоретичні відомості	17
3.2 Порядок виконання роботи	19
3.3 Зміст звіту	20
3.4 Контрольні питання	20
4 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 МЕТОДИ СПРЯЖЕНИХ ГРАДІЄНТІВ. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА – РІВСА	21
4.1 Короткі теоретичні відомості	21
4.2 Порядок виконання роботи	22
4.3 Зміст звіту	23
4.4 Контрольні питання	23
5 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5 квазіньютонівські методи. МЕТОД ДЕВІДОНА-ФЛЕТЧЕРА-ПАУЕЛЛА	24
5.1 Короткі теоретичні відомості	24
5.3 Зміст звіту	29
5.4 Контрольні питання	29
ЛІТЕРАТУРА	30

ВСТУП

Процес оптимізації лежить в основі діяльності випускників спеціальності 7.05010302 «Інженерія програмного забезпечення», оскільки класичні функції інженера полягають в тому, щоб, з однієї сторони, проектувати нові, більш ефективні та менш дорогі системи, а з іншої, розробляти методи збільшення якості функціонування існуючих систем.

Ефективність методів оптимізації, що дозволяють здійснити вибір найкращого варіанта без перевірки всіх можливих варіантів, тісно пов'язана з використанням тріади „модель-алгоритм-програма”.

Використання моделей зумовлено тим, що експерименти з реальними системами, як правило, вимагають дуже великих витрат засобів і часу, а також, в деяких випадках, пов'язані з ризиком. Моделі широко використовуються в інженерії, оскільки це надає можливості для реалізації найбільш економічного способу дослідження впливу змін в значеннях основних незалежних змінних на показники якості функціонування системи.

Оскільки вимоги до задач оптимізації є загальними та носять абстрактний характер, область використання методів оптимізації може бути доволі широкою. У зв'язку з цим в провідних університетах світу введені навчальні дисципліни “Engineering Optimization” та “Operation Research”, які викладаються на рівні бакалаврата, а в деяких випадках – на рівні магістратури. Така тенденція спостерігається і в вищих навчальних закладах України.

В даних методичних вказівках вирішуються задачі багатовимірної оптимізації. Аналіз задач такого типу займає важливе місце в оптимізаційних дослідженнях, як теоретичного, так і практичного напрямку.

1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД КОШІ

Мета роботи - вивчити градієнтні методи безумовної багатовимірної оптимізації.

1.1 Короткі теоретичні відомості

Важливість прямих методів велика, бо в ряді практичних задач інформація про значення цільової функції є єдиною надійною інформацією, якою володіє дослідник.

З іншого боку, при використанні навіть самих ефективних прямих методів для отримання рішення іноді необхідна надзвичайно велика кількість обчислень значень функції. Ця обставина разом з прагненням реалізувати можливості знаходження стаціонарних точок (точок, що задовольняють умові $f(x^*) = 0$) призводить до необхідності розгляду методів, які основані на використанні градієнта цільової функції. Вказані методи носять ітеративний характер, тому що компоненти градієнта виявляються нелінійними функціями керуючих змінних. Далі вважається, що $f(x)$, $\nabla f(x)$, $\nabla^2 f(x)$ існують та безперервні. Методи з використанням як 1-х, так і 2-х похідних проглядаються в їх зв'язку з більш корисними методами.

Особливе значення приділяється застосуванню методів спряжених градієнтів, в основі яких лежать введені вище поняття спряженості напрямків і так званих квазіньютонівських методів, які аналогічні методу Ньютона, але використовують інформацію тільки перших похідних. Припускається, що компоненти градієнта можуть бути записані в аналітичному вигляді або з достатньо високою точністю розрахунків за допомогою чисельних методів. Крім того, розглядаються способи чисельної апроксимації градієнтів. Всі методи, що описані, основані на ітераційній процедурі, яка реалізується у відповідності з формулою

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \alpha^{(k)} * S^{(k)} \quad (1.1),$$

де $X^{(k)}$ - поточне ближнє до рішення X^* ,

$\alpha^{(k)}$ - параметр, який характеризує довжину кроку.

$S^{(k)} = S'(X^{(k)})$ - напрямок пошуку в N – мірному просторі керуючих змінних $X_i (i = \overline{1, N})$.

Спосіб визначення $S^{(k)}$ та α на кожній ітерації пов'язаний з особливостями методу, що застосовується. Звичайно, вибір $\alpha^{(k)}$ здійснюється шляхом рішення задачі мінімізації $f(x)$ в напрямку $S(X^{(k)})$. Тому при реалізації методів, що вивчаються, необхідно використовувати ефективні алгоритми одновимірної мінімізації.

Метод Коші

Припустимо, що в деякій точці $\bar{x}$ простору керуючих змінних необхідно визначити напрямок найшвидшого локального спуску, тобто найбільшого локального зменшення цільової функції. Розложимо цільову функцію в окрестності точки $\bar{x}$ в ряд Тейлора,

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T \Delta x + \dots \quad (1.2)$$

та відкинемо члени другого порядку та вище. Можна побачити, що локальне зменшення цільової функції визначається 2-м доданком, оскільки значення $f(\bar{x})$ фіксовано. Найбільше зменшення f асоціюється з вибором такого напрямку $S(\bar{x})$ виразу (1.1), якому відповідає найбільша від'ємна величина скалярного множення, який є другим доданком розкладення (1.2). Вказаний вибір забезпечується при

$$S(\bar{x}) = -\nabla f(\bar{x}), \quad (1.3)$$

а другий доданок розкладення (1.2) приймає вигляд:
 $\Delta x = \alpha S(\bar{x}) = -\alpha \nabla f(\bar{x}); \quad \nabla f(\bar{x})^T \Delta x = -\alpha \nabla f(\bar{x})^T \nabla f(\bar{x})$. Розглянутий

випадок відповідає найшвидшому локальному спуску. Тому в основі найпростішого градієнтного методу лежить формула

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha \nabla f(x^{(k)}) \quad (1.4),$$

де α - заданий додатний параметр.

Метод має два недоліки:

- виникає необхідність вибору значення α ;
- методу властива повільна збіжність до точки мінімуму внаслідок малості ∇f навколо цієї точки.

Таким чином, правильно буде визначити значення α на кожній ітерації.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f(x^{(k)}) \quad (1.5).$$

Значення $\alpha^{(k)}$ обчислюється шляхом розв'язання задачі мінімізації $f(x^{(k+1)})$ в напрямку $\nabla f(x^{(k)})$ методом одновимірного пошуку.

Даний градієнтний метод пошуку носить назву методу найшвидшого спуску або методу *Коші*, оскільки Коші першим використав аналогічний алгоритм для рішення систем лінійних рівнянь. Пошук вздовж прямої у відповідності з формулою (1.5) забезпечує більш високу надійність методу Коші в порівнянні з найпростішим градієнтним методом (коли α не змінюється на кожній ітерації), однак швидкість його збіжності при розв'язку ряду практичних задач залишається недопустимо низькою. Це пояснюється тим, що змінення змінних безпосередньо залежить від величини градієнта, який прямує до 0 в околі точки мінімуму та відсутній механізм прискорення руху до точки мінімуму на останніх ітераціях. Одна з головних переваг методу Коші пов'язана з його стійкістю. Метод має важливу властивість, яка полягає в тому, що при достатньо малій довжині кроку ітерації забезпечують виконання нерівності:

$$f(x^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)}) \quad (1.6).$$

Метод Коші, як правило, дозволяє достатньо зменшити значення цільової функції прямують з точок, що розміщені на значних відстанях від точки мінімуму, і тому часто використовується при реалізації градієнтних методів в якості початкової процедури. На прикладі методу Коші можна продемонструвати окремі заходи, які використовуються при реалізації різних градієнтних алгоритмів.

Приклад використання методу Коші.

Розглянемо функцію $f(x) = 8x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$, використовуючи метод Коші для розв'язку задачі її мінімізації.

Рішення: Обчислимо компоненти градієнту:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 16x_1 + 4x_2; \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = 10x_2 + 4x_1.$$

Для того, щоб застосувати метод найшвидшого спуску, задамо початкове наближення $x^{[0]} = [10; 10]^T$ та за допомогою формули (1.5) побудуємо нове наближення.

$x^{(1)} = x^{(0)} - \alpha^{(0)} * \nabla f(x^{(0)})$. Оберемо $\alpha^{(0)}$ таким чином, щоб $f(x^{(1)}) \rightarrow \min$. $\alpha^{(0)} = 0.056$.

$$\nabla f(x^{(0)}) = [16x_1 + 4x_2; 10x_2 + 4x_1] = [200; 140]$$

$$\alpha^{(0)} \nabla f(x^{(0)}) = 0.056 * [200; 140] = [11.2; 7.84]$$

$$x^{(1)} = [10; 10] - [11.2; 7.84] = [-1.20; 2.16]$$

Далі знаходимо точку $x^{(2)} = x^{(1)} - \alpha^{(1)} * \nabla f(x^{(1)})$, обчислюємо градієнт в точці $x^{(1)}$ та проводимо пошук вздовж прямої

$$\nabla f(x^{(1)}) = [16x_1 + 4x_2; 10x_2 + 4x_1] = [-19.2 + 8.64; 21.6 - 4.8] = [-10.56; 16.8].$$

В таблиці 1.1 надані дані, отримані при проведенні ітерацій на основі одномірного пошуку методом кубічної апроксимації.

Таблиця 1.1 – Результати обчислень по методу Коші.

K	$X_1^{(k)}$	$X_2^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
1	-1,2403	2,1181	24,2300
2	0,1441	0,1447	0,3540
3	-0,0181	0,0309	0,0052
4	0,0021	0,0021	0,0000

Не зважаючи на те, що метод Коші має відносно невелике практичне застосування, він реалізує найважливіші кроки більшості градієнтних методів.

Схема алгоритму Коші представлена на рисунку 1.1.

Робота алгоритму завершується, коли модуль градієнту або модуль вектора Δx стають достатньо малим.

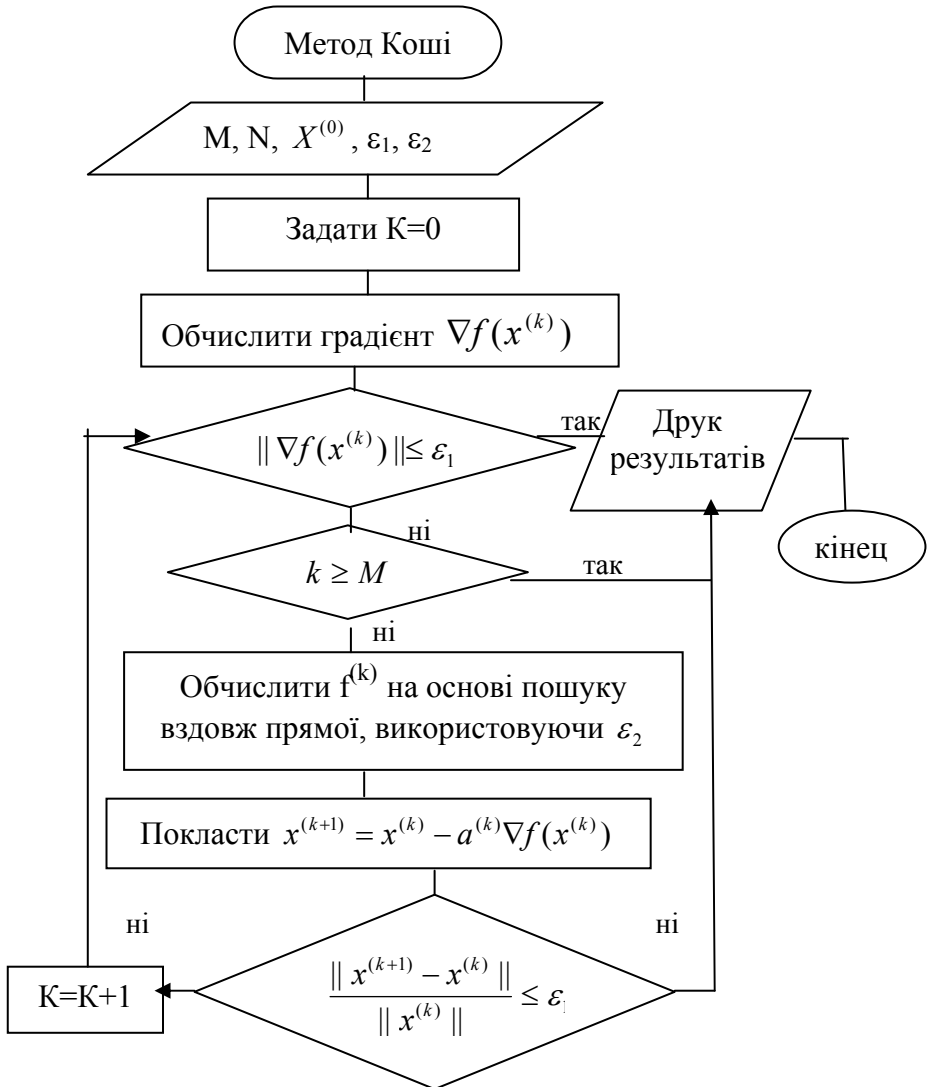


Рисунок 1.1 – Схема методу Коші

1.2 Порядок виконання роботи

2.2.1 Написати програму, що реалізує метод Коші.

2.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.2).

Таблиця 1.2 – Варіанти досліджуваних функцій

№ вар.	Функція	Почат. точка
1	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$
2	$y = (5 - 2x_1)^8 + (6 - 3x_2)^4$	$x^{(0)} = [3, 2]^T$
3	$y = (31 - 8x_1)^6 + (2 - 3x_2)^2$	$x^{(0)} = [1, -1]^T$
4	$y = 9 - 2(5x_1 + 2x_2) + x_1^2 + x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 2, 0, 1]^T$
5	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2 - 0,01x_1x_2$	$x^{(0)} = [-1, 0]^T$
6	$y = (10 - 2x_1)^2 + (12 - 5x_2)^4$	$x^{(0)} = [0, 3, 0, 5]^T$
7	$y = (8 - x_1)^2 - (7 - x_2)^2 + 3x_2^4$	$x^{(0)} = [-3, 5]^T$
8	$y = 19 - 15x_1 - 8x_2 + 3x_1^2 + x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$
9	$y = x_1^6 - (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2$	$x^{(0)} = [10, 20]^T$
10	$y = 2x_1^2 + 4x_1x_2^3 - 10x_1x_2 + x_2^3$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$
11	$y = 6x_1^4 + 8x_1x_2^6 - 13x_1x_2 + 4x_2^3$	$x^{(0)} = [3, 7]^T$
12	$y = 9 - 25x_1 + x_1^2 - 22x_2 + x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 1]^T$
13	$y = 22 x_1 ^7 + 24x_1^3x_2^6 - x_1x_2 + x_2^3$	$x^{(0)} = [-12, 17]^T$
14	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2 - 3x_1x_2$	$x^{(0)} = [-6, 7]^T$

Продовження табл. 1.2.

№ вар.	Функція	Почат. точка
15	$y = x_1^2 - x_1^3 x_2^2 - 9x_1 x_2 + x_2^3$	$x^{(0)} = [20, -10]^T$
16	$y = 18 - 20x_1 - 8x_2 + 2x_1^2 + 2x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$
17	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2 - x_1 - x_2$	$x^{(0)} = [-1, 6]^T$
18	$y = 3 - 3,3x_1 - 1,1x_2 + 3x_1^2 + 4x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$
19	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2 - x_1^{-1} x_2^2$	$x^{(0)} = [-1, 0]^T$
20	$y = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 4x_1 x_2 + x_1$	$x^{(0)} = [5, 3]^T$
21	$y = 2x_1^2 x_2^2 - 40x_1 x_2 + x_1^3$	$x^{(0)} = [8, -7]^T$
22	$y = 5x_1^3 + 8x_2^6 - 4x_1^3 x_2 + 5x_2$	$x^{(0)} = [2, 17]^T$
23	$y = 8x_1^6 + 33x_2^6 - 24x_1^3 x_2^3 + x_1^9$	$x^{(0)} = [3, -6]^T$
24	$y = 6x_1^{-2} + 2x_2^8 - 6x_1 x_2 + 8x_2^4$	$x^{(0)} = [-1, 2]^T$

1.3 Зміст звіту

- 1.3.1 Сформульована мета роботи.
- 1.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод.
- 1.3.3 Результати роботи програми.
- 1.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки.

1.4 Контрольні питання

- 1.4.1 Які недоліки має метод Коші?
- 1.4.2 Які переваги методу Коші?
- 1.4.3 Алгоритм методу Коші.

2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД НЬЮТОНА

Мета роботи - вивчити градієнтні методи безумовної багатовимірної оптимізації.

2.1 Короткі теоретичні відомості

Метод Ньютона

У методі Коші застосовується найкраща локальна стратегія пошуку з використанням градієнту. Однак, рух у напрямку, протилежному градієнту, приводить до точки мінімуму лише в тому випадку, коли лінії рівня функції f являють собою кола. Таким чином, напрямок, протилежний градієнту, загалом кажучи, не може бути придатним глобальним напрямком пошуку точок оптимуму нелінійних функцій. Метод Коші засновується на послідовній лінійній апроксимації цільової функції та потребує обчислень значень функції та її перших похідних на кожній ітерації. Для того, щоб побудувати більш загальну стратегію пошуку слід підключити інформацію про другі похідні цільової функції. Розкладемо цільову функцію в ряд Тейлора.

$$f(x) = f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T \nabla^2 f(x^{(k)}) \Delta x + o(x^3) \quad (2.1)$$

Відкидаючи всі члени розкладу третього порядку й вище, отримаємо квадратичну апроксимацію $f(x)$.

$$\tilde{f}(x; x^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T \nabla^2 f(x^{(k)}) \Delta x, \quad (2.2)$$

де $\tilde{f}(x; x^{(k)})$ - апроксимуюча функція змінної x , побудована в точці $x^{(k)}$.

На основі квадратичної апроксимації функції $f(x)$ сформулюємо послідовність ітерацій таким чином, щоб у знов здобутій точці $x^{(k+1)}$ градієнт апроксимуючої функції, тобто $\nabla \tilde{f}$ обертався на 0.

$$\nabla \tilde{f}(x; x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)}) \Delta x = 0. \quad (2.3)$$

Одержуємо:

$$\Delta x = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}). \quad (2.4)$$

Послідовне використання схеми квадратичної апроксимації приводить до реалізації оптимізаційного методу Ньютона за формулою:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}) \quad (2.5)$$

Властивості збіжності.

Наведемо аналіз властивостей збіжності методу Ньютона.

Доведено, що метод Ньютона виявляє квадратичну швидкість збіжності, тобто виконується умова

$$\|\mathcal{E}^{(k+1)}\| \leq c \|\mathcal{E}^{(k)}\|^2, \quad (2.6)$$

де константа c зв'язана з обумовленістю матриці Гессе $\nabla^2 f$.

Метод Ньютона збігається всякий раз, коли вибір $x^{(0)}$ здійснюється згідно умові

$$\|\mathcal{E}x^0\| < \frac{1}{c}. \quad (2.7)$$

В цьому випадку виконується нерівність (2.6).

Квадратична швидкість збіжності пояснюється тією обставиною, що метод заснований на квадратичній апроксимації.

При мінімізації довільних функцій доцільно вважати, що у випадку вибору початкової точки, яка задовольняє нерівності

$$\|\mathcal{E}x^0\| > \frac{1}{c},$$

використання методу не приводить до розв'язку.

Модифікований метод Ньютона

Досвід показує, що при дослідженні неквадратичних функцій метод Ньютона не відрізняється високою надійністю.

Дійсно, якщо точка $x^{(0)}$ знаходиться на значній відстані від точки x^* , крок за методом Ньютона часто виявляється досить великим, що може привести до відсутності збіжності. Метод можна досить легко модифікувати для того, щоб забезпечити зменшення цільової функції від ітерації до ітерації та здійснити пошук уздовж прямої як в методі Коші. Послідовність ітерацій будується згідно з формулою:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} \cdot \nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}). \quad (2.8)$$

Вибір $\alpha^{(k)}$ здійснюється таким чином, щоб $f(x^{(k+1)}) \rightarrow \min$.

Це гарантує виконання нерівності $f(x^{(k+1)}) \leq f(x^{(k)})$. Такий метод носить назву модифікований метод Ньютона. У випадках, коли розрахунок точних значень перших та других похідних не зв'язаний з суттєвими труднощами, він є надійним та ефективним. Однак, при використанні модифікованого методу Ньютона виникає необхідність будувати та рішення лінійного рівняння, що містить елементи матриці Гессе.

2.2 Порядок виконання роботи

2.2.1 Написати програму, що реалізує метод Ньютона.

2.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.2).

2.3 Зміст звіту

- 2.3.1 Сформульована мета роботи.
- 2.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод.
- 2.3.3 Результати роботи програми.
- 2.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки.

2.4 Контрольні питання

- 2.4.1 Відмінності методу Ньютона від методу Коші.
- 2.4.2 Наведіть аналіз властивостей збіжності методу Ньютона.
- 2.4.3 В чому полягає модифікація методу Ньютона?

3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МЕТОД НЬЮТОНА

Мета роботи - вивчити градієнтні методи безумовної багатовимірної оптимізації.

3.1 Короткі теоретичні відомості

Метод Марквардта

Даний метод є комбінацією методів Коші та Ньютонa, в якому добре сполучаються позитивні властивості обох методів. При використанні методу Марквардта необхідна інформація про значення других похідних цільової функції. Градієнт вказує напрямок найбільш локального збільшення цільової функції, а рух у напрямку, протилежному градієнту з точки $x^{(0)}$, розташованої на значній відстані від точки мінімуму x^* , зазвичай приводить до суттєвого зменшення цільової функції. З іншого боку, напрямки ефективного пошуку в околі точки мінімуму, визначаються методом Ньютонa. Ідея об'єднання методів Коші та Ньютонa була покладена в основу алгоритму, розробленого Марквардтом. Згідно цього методу напрямок пошуку визначається рівнянням:

$$S^{(k)} = -[H^{(k)} + \alpha^{(k)} \cdot I]^{-1} \cdot \nabla f(x)^{(k)}. \quad (3.1)$$

При цьому в формулі (1.1) покласти $\alpha^{(k)} = 1$, так як параметр λ дозволяє не тільки змінювати напрямок пошуку, але й регулювати довжину кроку.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} \cdot S(x^{(k)}),$$

де $x^{(k)}$ – поточне наближення до рішення x^* ;

$\alpha^{(k)}$ – параметр, що характеризує довжину кроку;

$S(x^{(k)})$ – це напрямок пошуку в n -мірному просторі управляючих змінних;

I – це одинична матриця, тобто матриця, всі елементи якої дорівнюють 0, за винятком діагональних елементів, що дорівнюють 1.

На початковій стадії пошуку $\lambda^{(0)}$ присвоюється велике значення, наприклад $\lambda^{(0)} = 10^4$. В цьому випадку

$$[H^{(0)} + \lambda^{(0)} \cdot I]^{-1} = [\lambda^{(0)} \cdot I]^{-1} = \frac{1}{\lambda^{(0)}} \cdot I. \quad (3.2)$$

При великому значенні $\lambda^{(0)}$ ($\frac{1}{\lambda^{(0)}}$ мале) напрям пошуку:

$$S^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)}). \quad (3.3)$$

З виразу (2.8) можна заключити, що при зменшенні λ до 0 $S(x)$ змінюється від напрямку, протилежного градієнту до напрямку, визначеному за методом Ньютона. Якщо після першого кроку отримана точка з меншим значенням цільової функції ($f(x^{(1)}) < f(x^{(0)})$), слід обрати $\lambda^{(1)} < \lambda^{(0)}$ та реалізувати ще один крок. Інакше слід покласти $\lambda^{(0)} = \beta \lambda^{(0)}$, де $\beta > 0$, та знову реалізувати попередній крок.

Алгоритм Марквардта

Крок 1. Задати $x^{(0)}$ початкове наближення до x^* , M – максимально припустима кількість ітерацій, E – параметр збіжності.

Крок 2. Покласти $K = 0$, $\lambda^{(0)} = 10^4$.

Крок 3. Обчислити $\nabla f(x^{(K)})$

Крок 4. Перевірити чи виконується нерівність $\|\nabla f(x^{(K)})\| < E$.

Якщо так – перейти до кроку 11, ні – перейти до наступного кроку.

Крок 5. Перевірити чи виконується нерівність $K \geq M$.

Так - перейти до кроку 11, ні - перейти до наступного кроку.

Крок 6. Обчислити $S(x^{(k)})$ за формулою (1.16).

Крок 7. Покласти $x^{(k+1)} = x^{(k)} + S(x^{(k)})$.

Крок 8. Чи виконується нерівність $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$.

Так - перейти до кроку 9, ні - перейти до кроку 10.

Крок 9. Покласти $\lambda^{(k+1)} = 1/2 \lambda^{(k)}$, $K = K + 1$. Перейти до кроку 3.

Крок 10. Покласти $\lambda^{(k+1)} = 2 \lambda^{(k)}$. Перейти до кроку 6.

Крок 11. Друк результатів і зупинка.

Метод Марквардта характеризується відносною простотою, властивістю спадання цільової функції при переході від ітерації до ітерації, високою швидкістю збіжності в околі точки мінімуму x^* , а також відсутністю процедури пошуку уздовж прямої. Головний недолік методу полягає в необхідності обчислення матриці Гессе й наступного рішення системи лінійних рівнянь, що відповідають рівнянню (1.16). Цей метод широко використовується при рішенні задач, у яких $f(x)$ записується у вигляді суми повних квадратів. Задача такого типу виникає, наприклад, у регресійному аналізі:

$$f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \dots + \dots + f_m^2(x) \quad (3.4)$$

Метод Марквардта відрізняється високою ефективністю при рішенні задач такого типу.

3.2 Порядок виконання роботи

3.2.1 Написати програму, що реалізує метод Марквардта.

3.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.2).

3.3 Зміст звіту

- 3.3.1 Сформульована мета роботи.
- 3.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод.
- 3.3.3 Результати роботи програми.
- 3.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки.

3.4 Контрольні питання

- 3.4.1 Відмінності методу Марквардта від методів Коші та Ньютона.
- 3.4.2 Чим характеризується метод Марквардта?
- 3.4.3 Алгоритм методу Марквардта.

4 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 МЕТОДИ СПРЯЖЕНИХ ГРАДІЄНТІВ. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА – РІВСА

Мета роботи - вивчити методи спряжених градієнтів безумовної багатовимірної оптимізації.

4.1 Короткі теоретичні відомості

Метод Флетчера – Рівса

Метод дозволяє знайти мінімум нелінійної цільової функції багатьох змінних вигляду

$$M = F(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

при відсутності обмежень. Метод заснований на застосуванні часткових похідних цільової функції по незалежним змінним і перевизначений для дослідження унімодальних функцій. За його допомогою можна досліджувати і мультимодальні функції, однак в цьому випадку слід брати декілька вхідних точок і перевіряти, чи в усіх випадках однакове рішення. Схема алгоритму метода Флетчера – Рівса представлена на рис. 4.1

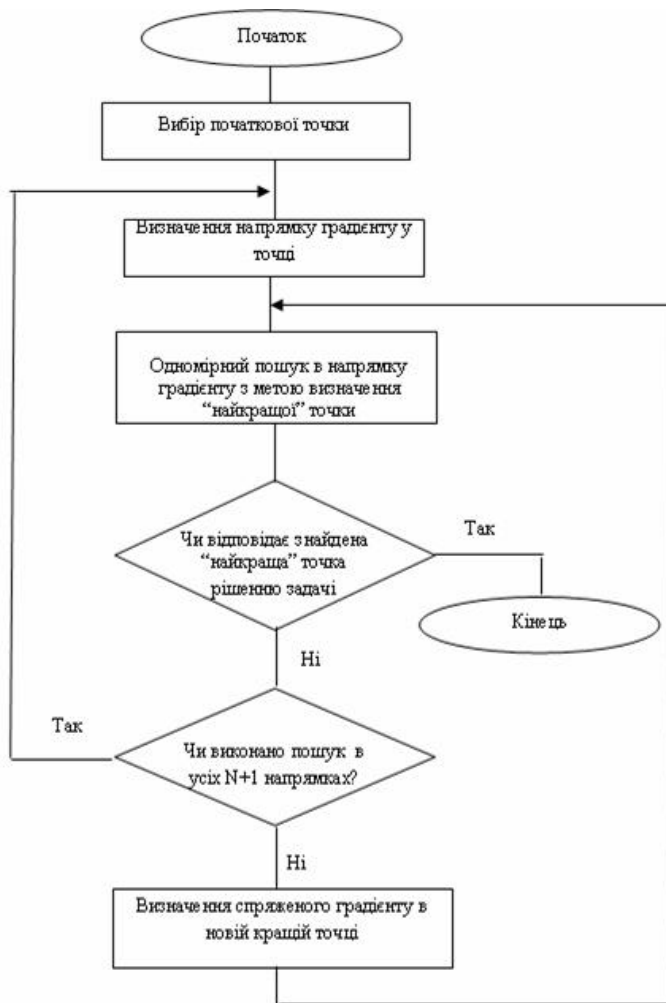


Рисунок 4.1 - Схема алгоритму метода Флетчера - Рівса

4.2 Порядок виконання роботи

4.2.1 Написати програму, що реалізує метод Флетчера – Рівса.

4.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.2).

4.3 Зміст звіту

- 4.3.1 Сформульована мета роботи.
- 4.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод.
- 4.3.3 Результати роботи програми.
- 4.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки.

4.4 Контрольні питання

- 4.4.1 На чому заснований метод Флетчера – Рівса?
- 4.4.2 Які функції можна досліджувати методом Флетчера - Рівса?
- 4.4.3 Алгоритм методу Флетчера – Рівса.

5 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №5

КВАЗІНЬЮТОНІВСЬКІ МЕТОДИ. МЕТОД ДЕВІДОНА-ФЛЕТЧЕРА-ПАУЕЛЛА

Мета роботи: ознайомитись з квазіньютонівськими методами. Вивчити принцип роботи даних методів детально розглянувши метод Девідона-Флетчера-Пауелла.

5.1 Короткі теоретичні відомості

Квазіньютонівські методи подібні до методів спряжених градієнтів, оскільки також засновані на властивостях квадратичної функції. Відповідно до методів спряжених градієнтів пошук рішень здійснюється по системі спряжених напрямків, тоді як квазіньютонівські методи мають позитивні риси методу Ньютона, однак використовують тільки перші похідні.

Побудова векторів напрямків пошуку здійснюється за допомогою формули:

$$x_{k+1} = x_k + \lambda^{(k)} s(x^{(k)}) \quad (*)$$

де x_k – поточне наближення до x^* , $\lambda^{(k)}$ – параметр що характеризує довжину кроку, $s(x^{(k)})$ – напрямок пошуку в n -мірному просторі. $s(x^{(k)})$ записується у вигляді

$$s(x^{(k)}) = -A^{(k)} \nabla f(x^{(k)}), \quad (5.1)$$

де $A^{(k)}$ - матриця метрики, порядку $n \times n$.

Методи пошуку уздовж напрямків, визначених цією формулою, мають назву змінної метрики, оскільки матриця A змінюється на кожній ітерації.

Метод змінної метрики являє собою квазіньютонівський метод, якщо відповідно до нього переміщення пробної точки задовольняє наступній умові:

$$\Delta x = C^{-1} \Delta g, \quad (5.2)$$

де Δx - переміщення x .

У методі Ньютона $\Delta x = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$ – це аналог C^{-1} у квазіньютонівському методі.

$\Delta g = g(x_{(1)} - x_{(0)})$, Δg - зміна градієнта при переході від $x_{(0)}$ до $x_{(1)}$.

Градієнт квадратичної функції: $\nabla f(x) = Cx + b = g(x)$

$$g(x_{(0)}) = Cx^{(0)} + b, \quad g(x^{(1)}) = Cx^{(1)} + b, \quad \Delta x = C^{-1} \Delta g$$

$\nabla^2 f(\bar{x})$ - матриця Гессе, симетрична матриця порядку $n \times n$ других похідних $f(x)$, що обчислюється у точці $\bar{x}$. Елемент матриці Гессе, розташований на перетині i -го рядка j -го стовпця, дорівнює $\partial^2 x / \partial x_i \partial x_j$

Для апроксимації матриці, зворотної до матриці Гессе, скористаємося наступною рекурентною формулою:

$$A^{k+1} = A^{(k)} + A^{k+1} c, \quad (5.3)$$

$A^k c$ – коригувальна матриця.

Матриця $A^{(k)}$ буде використовуватися в (5.1) і (*). Задача полягає в тому, щоб побудувати матрицю $A^{(k)}$ в такий спосіб щоб послідовність $A^{(0)}, A^{(1)}, \dots, A^{(k+1)}$ давала наближення до $H^{-1} = \nabla^2 f(x^*)^{-1}$, при цьому для одержання рішення x^* потрібний один додатковий пошук уздовж прямої, якщо $f(x)$ - квадратична функція.

Припустимо, що матриця C^{-1} апроксимується по формулі $\beta A^{(k)}$, де β - скалярна величина. Кращім є наближення, що задовольняє (5.2), тобто

$$\Delta x^{(k)} = \beta A^{(k)} \Delta g^{(k)} \quad (5.5)$$

Однак побудувати таку апроксимацію неможливо, оскільки для того щоб знайти $\Delta g^{(k)}$, необхідно знати матрицю $A^{(k)}$.

Будемо використовувати наступні позначення:

$$\Delta g^{(k)} = g^{(k+1)} - g^{(k)} \quad (5.6)$$

$$\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \quad (5.7)$$

Можлива вимога, щоб нове наближення задовольняло формулі (5.2)

$$\Delta x^{(k)} = \beta A^{(k+1)} g^{(k)} \quad (5.8)$$

Після підстановки (5.3) в (5.8) одержимо

$$\begin{aligned} \Delta x^{(k)} &= \beta A^{(k+1)} * g^{(k)} = \beta (A^{(k)} + A^{(k)}_c) \Delta g^{(k)} = \beta A^{(k)} \Delta g^{(k)} + \beta A^{(k)}_c \Delta g^{(k)} \\ A^{(k)}_c \Delta g^{(k)} &= \frac{1}{\beta} \Delta x^{(k)} - A^{(k)} \Delta g^{(k)} \end{aligned} \quad (5.9)$$

Можна переконатися, що матриця

$$A^{(k)}_c = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\Delta x^{(k)} y^T}{y^T \Delta g^{(k)}} \right) - \frac{(A^{(k)} \Delta g^{(k)} z^T)}{z^T \Delta g^{(k)}},$$

тут всі значення крім β – вектори, є рішеннями рівняння, y, z – довільні вектори, тобто наступна формула визначає деякий рід рішень.

Якщо покласти

$$y = \Delta x^{(k)} \text{ і } z = A^{(k)} \Delta g^{(k)}, \quad (5.10)$$

то отримаємо формулу, що реалізує метод Девідона-Флетчера-Пауелла :

$$A_c^{(k)} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\Delta x^{(k-1)} \Delta x^{(k)T}}{\Delta x^{(k)T} \Delta g^{(k)}} \right) - \frac{A^{(k)} \Delta g^{(k)} \Delta g^{(k)T} A^{(k)}}{\Delta g^{(k)T} A^{(k)} \Delta g^{(k)}} \quad (5.11')$$

$$A_{c-1}^{(k)} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\Delta x^{(k-1)} \Delta x^{(k-1)T}}{\Delta x^{(k-1)T} \Delta g^{(k-1)}} \right) - \frac{A^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)T} A^{(k-1)}}{\Delta g^{(k-1)T} A^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)}}$$

$$A^{(k+1)} = A^{(k)} + A_c^{(k)}$$

$$A^{(k)} = A^{(k-1)} + A_c^{(k-1)}$$

$$A^{(k)} = A^{(k-1)} + \left(\frac{\Delta x^{(k-1)} \Delta x^{(k-1)T}}{\Delta x^{(k-1)T} \Delta g^{(k-1)}} \right) - \frac{A^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)T} A^{(k-1)}}{\Delta g^{(k-1)T} A^{(k-1)} \Delta g^{(k-1)}} \quad (5.12)$$

Ця рекурентна формула має властивість симетрії й позитивної визначеності матриці.

Перша варіація (приріст, зміна):

$$\Delta f(x) = \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x \quad (5.13)$$

Використовуючи формули (*) і (5.1) одержуємо

$$x^{k+1} = x^k + \lambda^{(k)} s(x^{(k)}) \text{ та } s(x^{(k)}) = -A^{(k)} \nabla f(x^{(k)}).$$

$$\Delta x = x^{(k+1)} - x^{(k)} = \lambda^{(k)} s(x^{(k)}), \text{ звідси випливає що}$$

$$\Delta f(x) = \nabla f(x^{(k)})^T \lambda^{(k)} s(x^{(k)}) = -\nabla f(x^{(k)})^T \lambda^{(k)} A^{(k)} \nabla f(x^{(k)}), \quad (5.14)$$

звідки

$$\Delta f(x) = -\lambda^{(k)} \nabla f(x^{(k)})^T A^{(k)} \nabla f(x^{(k)}) \quad (5.15)$$

З (5.15) випливає, що $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$, тобто $\Delta f(x) < 0$ виконується при будь-яких значеннях $\lambda^{(k)} > 0$, якщо $A^{(k)}$ - позитивно

визначена матриця. У такий спосіб алгоритм забезпечує подвоєння цільової функції від ітерації до ітерації.

Метод Девідона-Флетчера-Пауелла є широко застосовуваним градієнтним методом. Він відрізняється стабільністю й успішно застосовується при вирішенні різних задач, що виникають на практиці. Основним недоліком методів такого типу є необхідність зберігати в пам'яті матрицю порядку $n \times n$.

На рисунку 5.1 наведена спрощена блок-схема алгоритму Девідона-Флетчера-Пауелла.

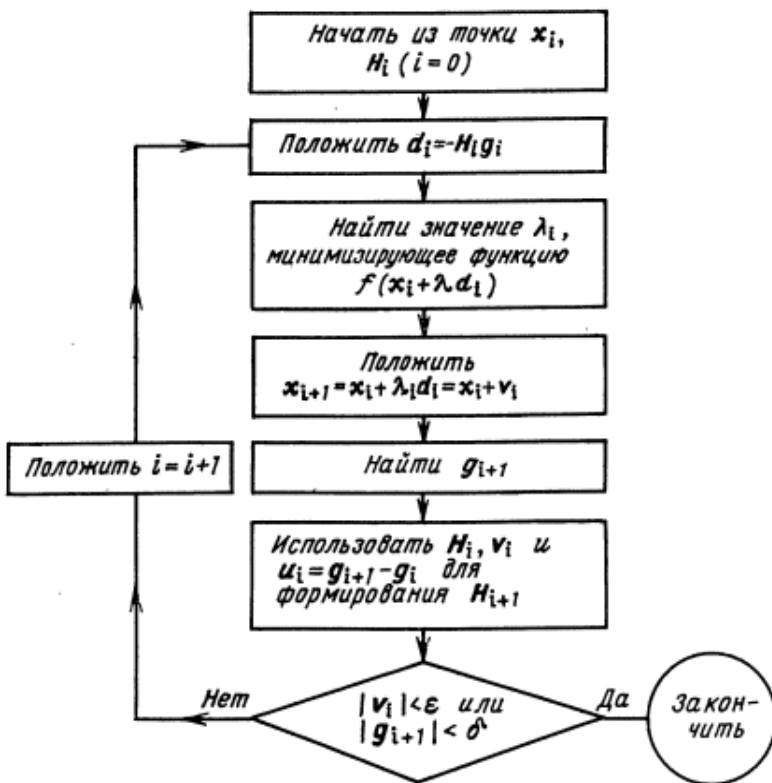


Рисунок 5.1 - Спрощена блок-схема алгоритму Девідона-Флетчера-Пауелла.

5.2 Порядок виконання лабораторної роботи

5.2.1 Написати програму, що реалізує метод Девідона-Флетчера-Пауелла.

5.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.2).

5.2.3 Порівняти безградієнтні та градієнтні методи багатовимірної оптимізації за точністю знаходження оптимуму, кількістю ітерацій та часом роботи.

5.3 Зміст звіту

5.3.1 Сформульована мета роботи.

5.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод.

5.3.3 Результати роботи програми.

5.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки

5.4 Контрольні питання

5.4.1 Яким чином здійснюється побудова вектору напрямів?

5.4.2 Дайте визначення $s(x^{(k)})$.

5.4.3 Поясніть, які методи називають методами змінної метрики?

5.4.4 Який аналог має C^{-1} в методі Ньютона?

5.4.5 Що являє собою симетрична матриця?

5.4.6 Яка матриця називається позитивно-визначеною?

5.4.7 Яким чином апроксимується матриця C^{-1} ?

5.4.8 Дайте визначення матриці Гессе.

5.4.9 Яка матриця вважається обумовленою?

ЛІТЕРАТУРА

- 1 Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс/ Б. Банди; пер. с англ.. - М.: Радио и связь, 1988.- 128 с.
- 2 Гилл Ф. Практическая оптимизация/ Ф. Гилл, У. Мюррей, М. Райт. -М.: Мир, 1985.-509 с.
- 3 Дубровин В.И. Идентификация и оптимизация сложных технических процессов и объектов / В.И Дубровин. - Запорожье: ЗГТУ, 1997. - 92 с.
- 4 Дубровін В.І. Методи оптимізації та їх застосування в задачах навчання нейронних мереж: навчальний посібник/ В.И Дубровин, С.О. Субботін.- Запоріжжя: ЗНТУ, 2003.- 136 с.
- 5 Исследование операций: Пер. с англ.: В 2-х т.:/под ред. Дж. Моудера, С. Элмаграби. - М.: Мир, 1981. Т.1- 712с, Т.2- 678с.
- 6 Таха. Введение в исследование операций: в 2-х кн./ А. Хзмди; пер. с англ. - М: Мир, 1985. Кн.1- 479с, Кн.2- 496с.
- 7 Химмельблау Д.М. Прикладное нелинейное программирование/ Д.М. Химмельблау. - М. : Мир, 1975. – 534 с.