МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Запорізький національний технічний університет

БАГАТОВИМІРНІ МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до лабораторних робіт з дисципліни
«Математичні методи оптимізації та дослідження операцій»
для студентів
напряму підготовки 6.050103 “Програмна інженерія”
всіх форм навчання

2014

Багатовимірні методи оптимізації. Методичні вказівки до лабораторних робіт з дисципліни «Математичні методи оптимізації та дослідження операцій» для студентів напряму підготовки 6.050103 “Програмна інженерія” всіх форм навчання / Укладачі: В.І. Дубровін, Л.Ю. Дейнега. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2014. – 40 с.

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

Рецензент: А.В. Притула

Відповідальний за випуск: В.І. Дубровін

Затверджено
на засіданні кафедри “Програмних засобів”

Протокол №3 від 20.10.14 р.

ЗМІСТ

ВСТУП

Процес оптимізації лежить в основі діяльності випускників напряму підготовки 6.050103 "Програмна інженерія" оскільки класичні функції інженера заключаються 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 являються загальними та носять абстрактний характер, область використання методів оптимізації може бути доволі широкою. У зв'язку з цим в провідних університетах світу введені учбові 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.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 МЕТОДИ ПРЯМОГО ПОШУКУ В ЗАДАЧАХ БАГАТОВИМІРНОЇ БЕЗУМОВНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ. МОДИФІКОВАНА ПРОЦЕДУРА ПОШУКУ ПО СИМПЛЕКСУ НЕДЛЕРА-МІДА

Мета роботи - вивчити метод безумовної багатовимірної оптимізації Нелдера-Міда.

1.1 Короткі теоретичні відомості

Метод пошуку по симплексу (s^2 - метод)

При вирішенні задач з двома змінними можна скористатися квадратним зразком. Найкраща (F_{min}) з 5 досліджуваних точок вибирається як наступна базова точка, навколо якої будується наступний зразок. Якщо жодна з кутових точок не має переваг перед базовою, розміри зразка слід зменшити, після чого продовжити пошук. Цей тип еволюційної оптимізації був використаний для аналізу функціонування промислових підприємств, коли ефект варіювання значень змінних, що описують виробничі процеси, вимірюється з помилкою. У задачі великої розмірності обчислення значень цільової функції проводиться у всіх вершинах, а також в центрі тяжіння гіперкуба, тобто в точках так званого кубічного зразка. Гіперкубом називається куб в N-вимірному евклідовому просторі, тобто безліч X=(X1,X2.,XN)Є N, $a_i \le x_i \le b_i$, i=1,N, де a і b - задані числа.

Якщо кількість змінних (розмірність простору, в якому ведеться пошук) рівна N, то пошук за кубічним зразком вимагає 2N+1 обчислень значення функції для даного зразка. При збільшенні розмірності задачі необхідна кількість обчислень значення цільової функції зростає надзвичайно швидко. Таким чином, не дивлячись на логічну простоту пошуку за кубічним зразком, виникає необхідність використання ефективніших методів прямого пошуку для вирішення задач оптимізації, що виникають на практиці.

Одна із стратегій пошуку покладена в основу методу пошуку по симплексу. Процедура симплексного пошуку базується на тому, що експериментальним зразком, який містить найменшу кількість точок, є регулярний симплекс. **Регулярний симплекс** в N-мірному просторі-багатогранник, утворений N+1 рівновіддаленими одна від одної точками (вершинами). В разі двох змінних, симплексом є рівносторонній трикутник, в тривимірному просторі, симплекс є тетраедром. У алгоритмі симплексного методу використовується властивість симплексу, згідно якій новий симплекс можна побудувати на будь-якій грані початкового симплексу шляхом перенесення обраної вершини на належну відстань вздовж прямої, проведеної через центр тяжіння решти вершин початкового симплексу. Отримана таким чином точка є вершиною нового симплексу, а обрану при побудові початкового симплексу вершину виключають. Потрібне одне обчислення значення цільової функції (при переході до нового симплексу).

Робота алгоритму починається з побудови регулярного симплексу в просторі незалежних змінних і оцінювання значень цільової функції в кожній з вершин симплексу. При цьому визначається вершина, якою відповідає найбільше значення цільової функції. Потім знайдена вершина проектується через центр тяжіння решти вершин в нову точку, яка використовується як вершина нового симплексу. Якщо функція зменшується достатньо плавно, ітерації продовжуються до тих пір, поки або не буде накрита точка мінімуму, або не почнеться циклічний рух по симплексу. У таких ситуаціях можна скористатися наступними трьома правилами:

Правило 1. *«Накриття» точки мінімуму.*

Якщо вершина, якій відповідає найбільше значення цільової функції, побудована на попередній операції, то замість неї береться вершина, якій відповідає наступне за величиною значення цільової функції.

Правило 2. *Циклічний рух.*

Якщо деяка вершина симплексу не виключається впродовж більш, ніж M ітерацій, то необхідно зменшити розмір симплексу за допомогою коефіцієнта редукції і побудувати новий симплекс, вибравши як базову точку, якій відповідає мінімальне значення цільової функції.

Запропоновано обчислювати M за формулою:

$$M=1.65*N+0.05*N^2 \tag{1.1}$$

де N - розмірність задачі;

M - округляється до найближчого цілого.

Для застосування даного правила потрібно встановити величину коефіцієнта редукції.

Правило 3. *Критерій закінчення пошуку.*

Пошук завершується, коли розміри симплексу або різниці між значеннями функції у вершинах стають достатньо малими. Щоб можна було застосовувати ці правила, необхідно задати величину параметра закінчення пошуку. Реалізація алгоритму, що вивчається, заснована на обчисленнях двох типів:

1. Обчислення координат регулярного симплексу при заданих базовій точці і масштабному множнику.
2. Розрахунку координат віддзеркаленої точки.

При заданій початковій точці X(0) і масштабному множнику α координати решти N вершин симплексу в N-мірному просторі обчислюються за формулою(1.2)

$$x^{(i)}=\begin{cases} x_j^{(0)}+\delta_1, \text{ якщо } i\neq j, \\ \\ x_j^{(0)}+\delta_2, \text{ якщо } i=j \end{cases} \tag{1.2}$$

для i,j=1,2,…,N,

де i - номер вершини;

j - номер координати.

Прирости δ_1 і δ_2, які залежать тільки від N і вибраного множника α, обчислюються за наступними формулами (1.3) і (1.4).

$$\delta_1 = \left[\frac{(N+1)^{1/2} + N - 1}{N\sqrt{2}}\right] \cdot \alpha \qquad (1.3)$$

$$\delta_2 = \left[\frac{(N+1)^{1/2} - 1}{N\sqrt{2}}\right] \cdot \alpha \qquad (1.4)$$

Значення масштабного множника α вибирається виходячи з характеристик вирішуваного завдання.

При α=1 ребра регулярного симплексу мають одиничну довжину. Центр тяжіння решти N точок розташований в точці x_c:

$$x_c = \frac{1}{N}\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N} x^{(i)} \qquad (1.5)$$

Всі точки прямої, яка проходить через $x^{(j)}$ і x_c, задаються формулою:

$$x_c = x^{(j)} + \lambda * (x_c - x^{(j)}) \qquad (1.6)$$

При λ=1 отримуємо вихідну точку $x^{(j)}$, тоді як значення λ=1 відповідає центру тяжіння x_c. Для того, щоб побудований симплекс мав властивість регулярності, віддзеркалення має бути симетричним. Отже, нова вершина отримується при λ=2.

$$x^{(j)}_{\text{нова}} = 2 * x_c - x^{(j)}_{\text{попередня}}$$

<u>Приклад.</u> *Обчислення відповідно до методу пошуку по симплексу.*

Мінімізувати $f(x)=(1-x_1)^2+(2-x_2)^2$.

Розв’язок:

1. Для побудови початкового симплексу потрібно задати початкову точку і масштабувальний множник.

Хай $x^{(0)}=[0;0]^T$, α=2, тоді

$$\delta_1 = \frac{\sqrt{3}+2-1}{2\sqrt{2}} \cdot 2 = \frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{2}} = 1.9318$$;

$$\delta_2 = \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}} \cdot 2 = \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{2}} = 0.5176$$.

2.Використовуючи ці два параметри, обчислимо координати двох основних вершин симплексу:

$x^{(1)}$=[0+0.5176;0+1.9318]T=[0.5176;1.9318]T ;

$x^{(2)}$=[0+1.9318;0+0.5176]T=[1.9318;0.5176]T .

3.Даним точкам $x^{(1)}$ і $x^{(2)}$ відповідають значення цільової функції:

$f(x^{(1)})$ =0.2374 ;

$f(x^{(2)})$ =3.0658 .

4.Оскільки $f(x^{(0)})$=5, необхідно відобразити точку $x^{(0)}$ через центр тяжіння решти двох вершин.

$$x_c = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} x^{(i)} = \frac{1}{2}(x^{(1)} + x^{(2)}) \quad (1.7)$$

5.Використовуючи формулу (1.6), отримуємо:

$x^{(3)}=x^{(1)}+x^{(2)}-x^{(0)}$

$x^{(3)}=[0.5176+1.9318-0;1.9318+0.5176-0]^T=[2.4494;2.4494]^T$

У отриманій точці $f(x^{(3)})$=2,3027.

Тобто, спостерігається зменшення цільової функції. Новий симплекс утворений точками $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, $x^{(3)}$. Відповідно до алгоритму, слід відобразити точку $x^{(2)}$, якій відповідає найбільше значення цільової функції, через центр тяжіння точок $x^{(1)}$ і $x^{(3)}$. Ітерації продовжуються, поки не буде потрібно застосування сформульованих вище правив 1, 2, 3.

Викладений вище алгоритм S^2-методу має декілька очевидних переваг:

1. Розрахунки і логічна структура методу відрізняються порівняльною простотою, і, отже, відповідна програма виявляється відносно короткою.

2. Рівень вимог до обсягу пам'яті невисокий. Масив має розмірність (N+1, N+2).

3. Використовується порівняно невелике число заздалегідь встановлених параметрів (α, коефіцієнт редукції і параметр закінчення пошуку).

4. Алгоритм виявляється ефективним навіть в тих випадках, коли помилка обчислення значень цільової функції велика, оскільки при його реалізації оперують найбільшими значеннями функції у вершинах, а не найменшими.

Алгоритм має ряд недоліків:

1. Не виключено виникнення складностей, пов'язаних з масштабуванням, оскільки всі координати вершин симплексу залежать від одного і того ж масштабованого множника α. Щоб обійти складності такого роду в практичних завданнях, слід промасштабувати всі змінні для того, щоб їх значення були порівнянними за величиною.

$$Z = \frac{X_i - X_{i,0}}{\Delta X_i} \tag{1.8}$$

2. Алгоритм працює дуже повільно, оскільки отримана на попередніх ітераціях інформація не використовується для прискорення пошуку.

3. Не існує простого способу розширення симплексу, що не вимагає перерахунку значень цільової функції в усіх точках зразка.

Таким чином, якщо α з якої-небудь причини зменшується, наприклад, якщо зустрічає зону з вузькою западиною або хребтом, то пошук повинен продовжуватися із зменшеною величиною кроку.

Симплексний метод рекомендується для використання при безперервній оптимізації промислових об'єктів в умовах високого рівня шумів і дрейфу екстремальної точки цільової функції.

Модифікована система пошуку по симплексу Нелдера – Міда

Хоча формула для визначення регулярного симплексу виявляється доволі зручною при побудові початкового зразка, проте вірних підстав для збереження властивостей регулярності симплексу в процесі пошуку немає. Отже, при віддзеркаленні симплексу існує можливість, як його розтягування, так і стискування. З цієї причини процедуру Нелдера- Міда інколи називають методом пошуку по деформованому багатограннику. При розрахунках по методу Нелдера-Міда використовуються вершини симплексу $x_{(h)}$, яким відповідає найбільше значення цільової функції $f_{(h)}$, вершина $x_{(g)}$, якій відповідає наступне по величині значення цільової функції $f_{(g)}$ і $x_{(l)}$, якій відповідає найбільше значення цільової функції $f_{(e)}$.

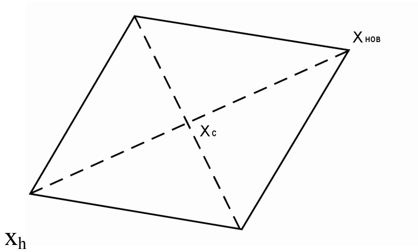
Віддзеркалення вершини симплексу здійснюється за прямою:

$$x=x_{(h)}+x^*(x_C-x_{(h)}) \tag{1.9}$$

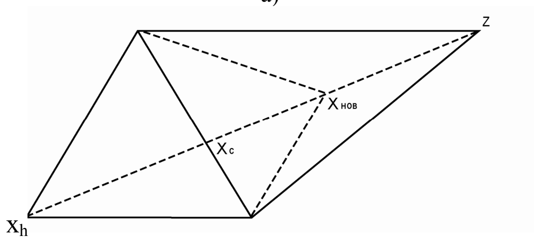
$$x=x_{(h)}+(1+\theta)^*(x_C-x_{(h)}) \tag{1.10}$$

При $\theta=1$ має місце нормальне віддзеркалення симплексу, оскільки точка $x_{нове}$ розташовується на відстані $(x_C-x_{(h)}))$ від точки x_c, при $-1<=\theta <=+1$ спостерігається стисле віддзеркалення або стиск симплексу. Вибір $\theta =>1$забеспечує розтягнуте віддзеркалення або розтягування симплексу.

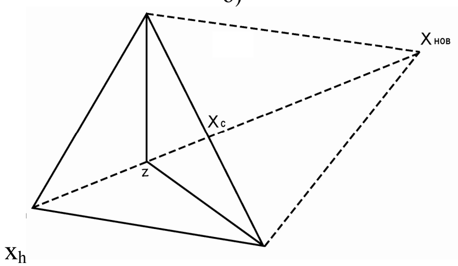
Різні види відображення представлені на рис. 1.1



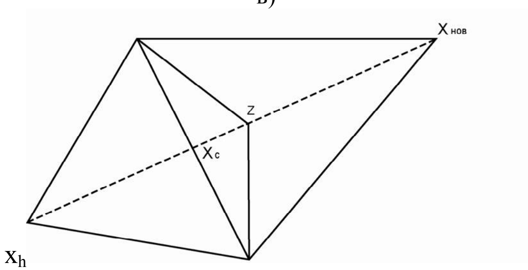
а)



б)



в)



д)

Рисунок 1.1 - Розтягування та зжимання симплексу:
а) нормальне відображення ($\theta=\alpha=1$), $f_{(l)}<f_{(g.)}$;
б) розтягування ($\theta=\alpha>1$), $f(x_{нов})<f_{(l)}$;
в) стиск ($\theta=\beta<0$), $f(x_{нов})>f_{(g)}$, $f(x_{нов})>f_{(h)}$;
д) стиск ($\theta=\beta>0$), $f^{(g)}<f(x_{нов})<f^{(h)}$

Три значення параметру θ, що використовуються при нормальному віддзеркаленні, стиску та розтягуванні, позначаються (λ,β,γ).

Реалізація методу починається з побудови початкового симплексу і визначення точок $x_{(h)}$, $x_{(g)}$, $x_{(e)}$, x_c, після нормального віддзеркалення здійснюється перевірка значень цільової функції за критерієм закінчення пошуку в точках відображеного симплексу, якщо пошук не закінчений за допомогою тестів, обирається одна з операцій: нормальне віддзеркалення, розтягування або стиск. Ітерації продовжуються, поки зміни значень цільової функції в вершинах симплексу не стануть незначними. Як задовільні значення параметрів (λ,β,γ) Нелдер і Мід рекомендують використовувати $\lambda=1$, $\beta=0{,}5$, $\gamma=2$.

Метод Нелдера-Міда володіє достатньою ефективністю і високою надійністю в умовах наявності випадкових збурень або помилок при визначенні значень цільової функції.

1.2 Порядок виконання роботи

1.2.1 Написати програму, що реалізує метод пошуку Нелдера-Міда.

1.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції. Функції обирати згідно варіанту з табл. 1.1.

1.2.3 Навести приклади ситуацій, коли застосування методу Нелдера-Міда є прийнятним та неприйнятним.

Таблиця 1.1 – 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	$y = (1 - x_1)^2 + (2 - x_2)^2 - 3x_1x_2$	$x^{(0)} = [-6, 7]^T$
15	$y = x_1^2 - x_1^3x_2^2 - 9x_1x_2 + x_2^3$	$x^{(0)} = [20, -10]^T$
16	$y = 18 - 20x_1 - 8x_2 + 2x_1^2 + 2x_2^2$	$x^{(0)} = [0, 0]^T$

№ вар.	Функція	Почат. точка
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	$y = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 4x_1x_2 + x_1$	$x^{(0)} = [5, 3]^T$
21	$y = 2x_1^2x_2^2 - 40x_1x_2 + x_1^3$	$x^{(0)} = [8, -7]^T$
22	$y = 5x_1^3 + 8x_2^6 - 4x_1^3x_2 + 5x_2$	$x^{(0)} = [2, 17]^T$
23	$y = 8x_1^6 + 33x_2^6 - 24x_1^3x_2^3 + x_1^9$	$x^{(0)} = [3, -6]^T$
24	$y = 6x_1^{-2} + 2x_2^8 - 6x_1x_2 + 8x_2^4$	$x^{(0)} = [-1, 2]^T$

1.3 Зміст звіту

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

1.4 Контрольні питання

1.4.1 Наведіть класифікацію методів безумовної багатовимірної оптимізації.

1.4.2 Опишіть метод пошуку за симплексом.

1.4.3 Охарактеризуйте ситуацію накриття точки мінімуму, що виникає під час симплексного пошуку.

1.4.4 Охарактеризуйте ситуацію циклічного руху під час симплексного пошуку.

1.4.5 Що є критерієм закінчення симплексного пошуку?

1.4.6 Як визначаються координати вершин початкового симплексу?

1.4.7 Як визначаються координати відображеної вершини симплексу?

1.4.8 Переваги та недоліки методу пошуку за симплексом.

1.4.9 Коли треба використовувати симплексний метод?

1.4.10 Опишіть модифіковану процедуру пошуку за симплексом Нелдера-Міда.

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 2. МЕТОД ПОШУКУ ХУКА-ДЖИВСА. МОДИФІКАЦІЇ ПРОЦЕДУРИ ХУКА-ДЖИВСА

Мета роботи - вивчити метод безумовної багатовимірної оптимізації Хука-Дживса.

2.1 Короткі теоретичні відомості

Процедура Хука-Дживса є комбінацією дослідницького пошуку і прискореного пошуку за зразком з використанням певних евристичних правил. Дослідницький пошук орієнтований на виявлення характеристик локальної поведінки цільової функції і визначення напряму уздовж «ярів». Отримана в результаті дослідницького пошуку інформація потім використовується в процесі пошуку за зразком при русі по «ярах».

Для проведення **дослідницького пошуку** необхідно задати величину шагу, яка може бути різною для різних координат і напрямів і змінюватися в процесі пошуку. Дослідницький пошук починається, якщо значення цільової функції в пробній точці не перевищує значення функції в початковій точці. Цей шаг пошуку розглядається як успішний. Інакше необхідно повернутися в попередню точку, і зробити крок в протилежному напрямі з подальшою перевіркою значення цільової функції.

Якщо в результаті виходить точка з меншим значенням цільової функції, чим в точці $X^{(к)}$, то вона розглядається як нова базова точка $X^{(к+1)}$. З іншого боку, якщо дослідницький пошук невдалий, необхідно повернутися в точку $X^{(к)}$ і провести дослідницький пошук з метою виявлення нового напряму мінімізації. Зрештою виникає ситуація коли такий пошук не приводить до успіху. В цьому випадку потрібно зменшити величину шагу шляхом введення деякого множника і відновити дослідницький пошук. Пошук завершується коли величина шагу стає досить малою. Послідовність точок, отриманих в процесі реалізації методу, можна записати в такому вигляді:

$X^{(к)}$ – поточна базова точка;

$X^{(к-1)}$ – попередня базова точка;
$X_p^{(к+1)}$ – точка побудови в наближенні до зразка;
$X^{(к+1)}$ – наступна нова базова точка.

Приведена послідовність характеризує логічну структуру пошуку по методу Хука-Дживса.

Алгоритм методу пошуку Хука-Дживса

Шаг 1: Визначити початкову точку X_0, прирощення Δ_i, i=1,…,N коефіцієнт зменшення кроку $\alpha>1$ і параметр закінчення пошуку $\varepsilon>0$.

Шаг 2: Провести дослідницький пошук.

Шаг 3: Перевірити, чи був дослідницький пошук вдалий (чи знайдена точка з меншим значенням цільової функції)?

«Так»: перейти до шагу 5.

«Ні» : продовжити.

Крок 4: перевірка закінчення пошуку. Чи виконується нерівність $||\Delta x||>\varepsilon$?;

«Так» : припинити пошук, поточна точка апроксимує точку оптимуму X*.

«Ні» : зменшити приріст $\Delta_i = \Delta_i/\alpha_i$, i=1,…,N. Перейти до шагу 2.

Шаг 5 : Провести **пошук за зразком**: $X_p^{(к+1)=} X^{(к)}+ (X^{(к)}- X^{(к-1)})$

Шаг 6 : Провести дослідницький пошук, використовуючи $X_p^{(к+1)}$ як базову точку. Хай $X^{(к+1)}$ – отримана в результаті точка.

Шаг 7 : Чи виконується умова $f(X^{(к+1)})<f(X^{(к)})$?.

«Так» : покласти $X^{(к-1)} = X^{(к)}$; $X^{(к)}= X^{(к+1)}$. Перейти до шагу 5.

«Ні» : перейти до шагу 6.

Приклад пошуку за методом Хука-Дживса.

Знайти точку мінімуму функції $f(x)=8x_1^2+4x_1x_2+5x_2^2$, використовуючи точку $x^{(0)}[-4;-4]^T$.

Розв'язок.

Для того, щоб використати метод прямого пошуку Хука-Дживса, необхідно знати такі векторні величини:

- векторна величина прирощення $\Delta x=[-1;1]^T$;

- коефіцієнт зменшення шагу $\alpha=2$;

- параметр закінчення пошуку $\varepsilon=10^{-4}$.

Ітерації починаються з дослідницького пошуку навколо точки x_0, що відповідає значенню $f(x^{(0)})=272$.

Фіксуючи x_2, дамо приріст x_1.

$x_2= -4$.

$x_1= -4+1 \rightarrow f(-3;-4)=200< f(x^{(0)})=272 \rightarrow$ успіх.

Це означає, що необхідно зафіксувати x_1=-3 та дати приріст змінній x_2.

x_2=-3

$x_1=-4+1 \rightarrow f(-3;-3)=153<200 \rightarrow$ успіх.

Таким чином, в результаті дослідницького пошуку знайдемо точку $x^{(1)}=[-3;-3]^T$.

$f(x_1^{(1)})=153$.

Оскільки дослідницький пошук був успішнім, переходимо до пошуку за зразком.

$X^{(2)}=x^{(1)}+(x^{(1)}-x^{(0)})=[-2;-2]^T$.

$F(x_p^{(2)})=68$.

Далі проводимо дослідницький пошук навколо точки $x_p^{(2)}$, який виявляється успішним при застосуванні додатних змінних x_1, x_2.

В результаті отримуємо точку $x^{(2)}=[-1;-1]^T$.

$f(x_2)=17$.

$F(x^{(2)}) < f(x^{(1)})$, пошук за зразком можемо вважати успішним, $x^{(2)}$ стає новою базовою точкою при проведенні нового пошуку за зразком.

Ітерації продовжуються доки зменшення величини шагу не вкаже на закінчення пошуку в околиці точки.

Модифікації процедури Хука-Дживса

Метод Хука-Дживса характеризується нескладною стратегією пошуку, відносною простотою обчислення і невисоким рівнем вимог до об'єму пам'яті, який виявляється нижчим, ніж при використанні методу пошуку за симплексом.

Завдяки цьому алгоритм Хука-Дживса знаходить широке застосування на практиці.

Особливо зручний метод з використанням штрафних функцій, проте заснований на циклічному проходженні по координатах алгоритм у ряді випадків може закінчувати роботу передчасно, а при отриманні значних нелінійних дефектів вироджується в послідовність дослідницьких пошуків без переходу до прискорювального пошуку за зразком.

Відомий цілий ряд підходів до удосконалення методу Хука-Дживса. Відома модифікація процедури Хука-Дживса шляхом введення додаткових правил збільшення і зменшення приросту змінних, а також правило зменшення кроку за зразком, який застосовується в тих випадках, коли звичайний крок виявляється невдалим.

Експерименти дозволили допрацювати іншу фазу реалізації алгоритму, яку називають використанням зразка.

Якщо рух за зразком проходить до успіху, є певні підстави для того, щоб повністю використовувати можливості пошуку уподовж прямої, визначеної зразком, або принаймні збільшити довжину кроку за зразком. Така дія часто дозволяє істотно прискорити збіжність методу.

При іншій модифікації методу змінюється фаза дослідницького пошуку шляхом введення системи ортогональних напрямів пошуку, орієнтація якої випадковим чином міняється на кожній ітерації.

2.2 Порядок виконання роботи

2.2.1 Написати програму, що реалізує метод пошуку Хука-Дживса.

2.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.1).

2.2.3 Навести приклади ситуацій, коли застосування методу Хука-Дживса є прийнятним та неприйнятним.

2.2.4 Порівняти методи Нелдера-Міда та Хука-Дживса за точністю знаходження оптимуму, кількістю ітерацій та часом роботи.

2.3 Зміст звіту

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

2.4 Контрольні питання

2.4.1 Опишіть метод пошуку Хука-Дживса.
2.4.2 Яка мета дослідного пошуку в процедурі Хука-Дживса?
2.4.3 В чому полягає пошук за зразком в процедурі Хука-Дживса?
2.4.4 Які існують модифікації процедури Хука-Дживса?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3 МЕТОД СПРЯЖЕНИХ НАПРЯМКІВ ПАУЕЛЛА

Мета роботи - вивчити метод спряжених напрямків Пауелла.

3.1 Короткі теоретичні відомості

Найбільш ефективним з алгоритмів прямого пошуку є метод, розроблений Пауеллом. При роботі цього алгоритму інформація, отримана на попередніх ітераціях, використовується для побудови векторів напряму пошуку, а також для усунення зациклення послідовності координатних пошуків.

Метод орієнтований на вирішення завдань з квадратичними цільовими функціями і ґрунтується на фундаментальних теоретичних результатах.

Завдання з квадратичними цільовими функціями займають важливе місце в теорії оптимізації з двох причин:

1. Квадратична функція є найбільш простим типом нелінійних функцій, для яких може бути сформульовано завдання безумовної оптимізації. Лінійні функції не мають внутрішнього оптимуму. Отже, якщо за допомогою того або іншого методу успішно вирішуються завдання оптимізації з цільовими функціями загального вигляду, то такий метод повинен виявитися ефективним при вирішенні завдань з квадратичними функціями.

2. В околі точки оптимуму будь-яку нелінійну функцію можна апроксимувати квадратичною функцією, оскільки лінійний член розкладання Тейлора звертається в нуль. Отже, робота алгоритму при вирішенні завдань з квадратичними функціями дозволяє отримати певні уявлення про збіжність алгоритму у разі, коли мінімізується функція загального вигляду.

Основна ідея алгоритму полягає в тому, що якщо квадратична функція N змінних приведена до виду суми повних квадратів, то її оптимум може бути знайдений в результаті реалізації N одновимірних пошуків по перетворених координатних напрямах.

Процедура перетворення квадратичної функції

$$q(x) = a+b^T x+1/2x^T Cx \quad (3.1)$$

до вигляду суми повних квадратів еквівалентна знаходженню такої матриці перетворення T, що приводить матрицю квадратичної форми до діагонального вигляду. Таким чином, задана квадратична форма

$$Q(x) = x^T Cx \quad (3.2)$$

шляхом перетворення

$$x = TZ \quad (3.3)$$

приводиться до вигляду

$$Q(x)=Z^T T^T CTz=Z^T DZ, \quad (3.4)$$

де D — діагональна матриця, тобто елементи D відмінні від нуля тільки при i=j.

Нехай t_j — j-й стовпець матриці T. Тоді перетворення дозволяє записати кожен вектор x у вигляді лінійної комбінації стовпців t_j:

$$x = TZ = t_1 z_1 + t_2 z_2 + ... + t_N z_N \quad (3.5).$$

Іншими словами, замість координат вектора x в стандартній координатній системі, визначеній безліччю векторів, використовуються координати вектора в новій координатній системі, яка задана векторами t_j. Крім того, система векторів t_j відповідає головним осям даної квадратичної форми, оскільки матриця квадратичної форми приводиться до діагонального вигляду.

За допомогою перетворення змінних квадратичної функції будується нова система координат, співпадаючих з головними осями квадратичної функції. Отже, одновимірний пошук точки оптимуму в просторі перетворених змінних z еквівалентний пошуку уздовж кожної з головних осей квадратичної функції. Оскільки напрям головних осей визначається векторами t_j, одновимірний пошук проводиться в напрямах, заданих цими векторами.

Проілюструємо вищевикладене прикладом.

Перетворення до вигляду суми квадрата.

Розглянемо функцію:

$f(x)=4x_1^2+3x_2^2-4x_1x_2+x_1$

і перетворення: $x_1=z_1+0.5*z_2$; $x_2=z_2$

Перетворена квадратична функція набирає такого вигляду:

$f(z)=4z_1^2+2z_2^2+z_1+0.5z_2$

Це перетворення не є єдиним, зокрема перетворення

$$x=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/3 & 1 \end{pmatrix} z$$

також приводить матрицю квадратичної форми до діагонального вигляду.

Задаючи початкову точку $x_0=[0,0]^T$ і два стовпці матриці перетворення $t_1=[1,0]^T$, $t_2=[0.5,1]^T$ можна знайти точку оптимуму в результаті проведення двох послідовних пошуків в напрямах t_1, t_2. Пошук у напряму t_1 по формулі:

$x_{(1)}=x(0)+\lambda*t_1=[0,0]^T+\lambda*[1,0]^T$

дозволяє отримати $\lambda=1/8$ і точку $x_{(1)}=[-1/8, 0]^T$.

Далі $x_{(2)} = x_{(1)}+\lambda*t_2= [-1/8, 0]^T+\lambda*[0.5,1]^T=[-1/8, 0]^T-1/8*[0.5,1]^T=$

$=[-3/16, -1/8]^T$.

З розглянутого прикладу виходить, що якщо система векторів t_j, $j=1,\ldots,N$ або система зв'язаних напрямів побудована, то точку оптимуму квадратичної функції можна знайти в результаті реалізації

N одновимірних пошуків, які проводяться уздовж кожного з N напрямів t_j. Таким чином, невирішеними залишаються лише питання, пов'язані з побудовою системи векторів t_j. Якщо матриця C відома, то матрицю перетворення T можна знайти за допомогою методу Гауса-Жордана.

Метод Гауса-Жордана дозволяє представити матрицю C у вигляді перетворення

$$C=P^TDP \tag{3.6}$$,

$$(P^{-1})^TC(P^{-1})=D,\ T=P^{-1} \tag{3.7}$$.

Проте матриця C або її оцінка в даному випадку невідома, оскільки мова йде про побудову методу вирішення завдань безумовної оптимізації, при реалізації якого використовуються тільки значення функції і не використовуються значення перших і тим більше других похідних.

Проте, в цьому випадку можна побудувати систему зв'язаних напрямів на основі властивості квадратичних функцій.

Приклад мінімізації на основі властивості паралельного підпростору.

Знову розглянемо квадратичну функцію

$q(x)=4x_1^2+3x_2^2-4x_1x_2+x_1$

Нехай задано дві точки $x_{(1)}=[0,0]^T$, $x_{(2)}=[1,0]^T$ і напрям $d=[1,1]^T$.

Перший пошук проводиться вздовж прямої $x=[0,0]^T + \lambda[1,1]^T$ і приводить до точки:

$y_{(1)} = [-1/6 , -1/6]^T$,

($\lambda^* = -1/6$).

Другий пошук проводиться вздовж прямої $x=[1,0]^T + \lambda[1,1]^T$ і дозволяє отримати точку: $\lambda^*=-5/6$, відповідно

$y_{(2)}=[1,0]^T - 5/6^* [1,1]^T = [1,0]^T + [-5/6,-5/6]^T = [1/6,-5/6]^T$

$y_{(2)}=[1/6,-5/6]^T$

Згідно властивості паралельного підпростору напрям

$y_{(2)} - y_{(1)} = [1/6,-5/6] - [-1/6,-1/6]^T = [1/3,-2/3]^T$ пов'язаний з d=[1,1],

тобто за визначенням $[1,1]^T C [1/3,-2/3]^T =0$.

Вище розглядалося, що в разі двох змінних, оптимум q(x) можна знайти шляхом проведення пошуку вздовж прямої заданого напряму ($y_{(2)}-y_{(1)}$). Цей факт не важко перевірити, оскільки мінімум q(x) вздовж прямої

$x= [-1/6,-1/6]^T + \lambda[1/3,-2/3]^T$

досягається в точці $x^* = [-3/16,-1/8]^T$, ($\lambda= -1/16$), яка збігається з раніше отриманим рішенням.

3.2 Порядок виконання роботи

3.2.1 Написати програму, що реалізує метод спряжених напрямків Пауелла.

3.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл. 1.1).

3.2.3 Порівняти методи Нелдера-Міда, Хука-Дживса та Пауелла за точністю знаходження оптимуму, кількістю ітерацій та часом роботи.

3.3 Зміст звіту

3.3.1 Сформульована мета роботи.

3.3.2 Алгоритм та програма, що реалізує метод Пауелла.

3.3.3 Результати роботи програми.
3.3.4 Аналіз отриманих результатів і висновки.

3.4 Контрольні питання

3.4.1 До якого виду приводиться квадратична функція?
3.4.2 Як проводиться пошук оптимуму в просторі перетворених змінних?
3.4.3 Як знаходиться матриця перетворення?

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 4 ГРАДІЄНТНІ МЕТОДИ БАГАТОВИМІРНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Мета роботи - вивчити градієнтні методи безумовної багатовимірної оптимізації.

4.1 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 квазиньютонових 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

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

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

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

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

Спосіб визначення $S^{(k)}$ та α на кожній ітерації пов‘язаний з особливостями застосовуємого методу. 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 керуємих змінних необхідно визначити напрямок найшвидшого локального спуску, тобто найбільшого локального зменшення цільової функції. Розложимо цільову функцію в окружності точки $\bar{x}$ в ряд Тейлора,

$$f(x) = f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T \Delta x + \ldots \tag{4.2}$$

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 виразу (4.1), $S(\bar{x})$, якому відповідає найбільша від’ємна величина скалярного множення, який є другим доданком розкладення (4.2). Вказаний вибір забезпечується при

$$S(\bar{x}) = -\nabla f(\bar{x}) \;, \tag{4.3}$$

а другий доданок розкладення (4.2) приймає вигляд: $\Delta x = \alpha S(\bar{x}) = -\alpha \nabla f(\bar{x})$; $\nabla f(\bar{x})^T \Delta x = -\alpha \nabla f(\bar{x})^T \nabla f(\bar{x})$. Розглянутий випадок відповідає найшвидшому локальному спуску. Тому в основі найпростішого градієнтного методу лежить формула

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

де α - заданий додатній 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.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} \nabla f(x^{(k)}) \quad (4.5).$$

Значення $\alpha^{(k)}$ обчислюється шляхом розв'язання задачі мінімізації $f(x^{(k+1)})$ в напрямку $\nabla f(x^{(k)})\alpha$ 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 (4.5) 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 заключається в тому, що при достатньо малій довжині кроку ітерації забезпечують виконання нерівності:

$$f(x^{(k+1)}) \le f(x^{(k)}) \quad (4.6).$$

Метод Коші, як правило, дозволяє достатньо зменшити значення цільової функції прямуванням 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:

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

Для того, щоб застосувати метод найшвидшого спуску, задамо початкове наближення $x^{[0]} = [10;10]^T$ та за допомогою формули (4.5) побудуємо нове наближення.

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

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

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

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

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 4.1 надані дані, отримані при проведені ітерацій на основі одномірного пошуку методом кубічної апроксимації.

Таблиця 4.1 – Результати обчислень по методу Коші.

К	$X_1^{(k)}$	$X_2^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
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 4.1.

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

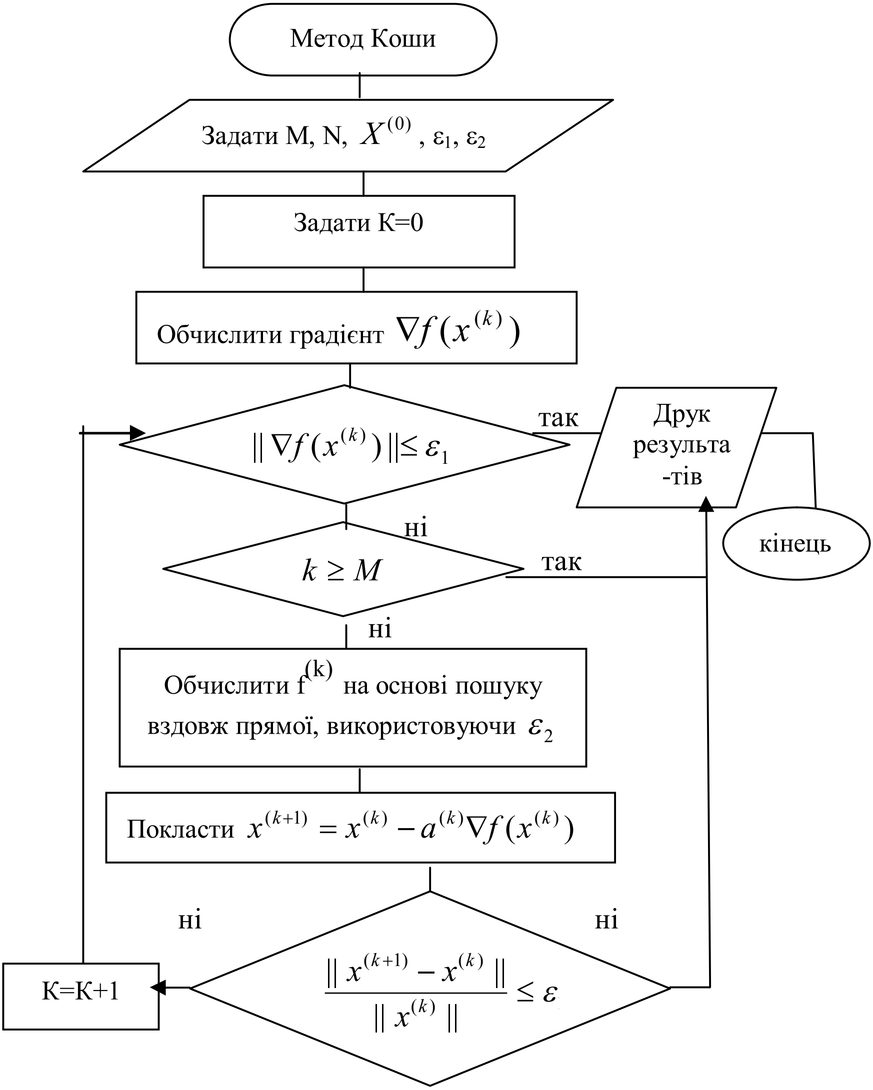


Рисунок 4.1 – Схема методу Коши

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.

$$f(x) = f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)T} \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x^{(k)})\Delta x + 0(x^3) \quad (4.7)$$

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

$$\tilde{f}(x;x^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x^{(k)})\Delta x, \quad (4.8)$$

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.

$$\nabla\tilde{f}(x;x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k)}) + \nabla^2 f(x^{(k)})\Delta x = 0\,. \quad (4.9)$$

Одержуємо:

$$\Delta x = -\nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)})\,. \qquad (4.10)$$

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

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}) \qquad . \qquad (4.11)$$

Властивості збіжності.

Наведемо аналіз властивостей збіжності методу Ньютона.

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

$$\left\|\varepsilon^{(k+1)}\right\| \le c\left\|\varepsilon^{(k)}\right\|^2, \qquad (4.12)$$

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

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

$$\left\|\varepsilon x^0\right\| < \frac{1}{c}. \qquad (4.13)$$

В цьому випадку виконується нерівність (4.11).

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 $\left\|\varepsilon x^0\right\| > \frac{1}{c}$, 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 $x^{(0)}$ находиться 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 формулі:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha^{(k)} \cdot \nabla^2 f(x^{(k)})^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}) . \qquad (4.14)$$

Вибір $\alpha^{(k)}$ здійснюється таким чином, щоб $f(x^{(k+1)}) \to \min$. Це гарантує виконання нерівності $f(x^{(k+1)}) \le f(x^{(k)})$. 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 будування та рішення лінійного рівняння, що містить елементи матриці Гессе.

Метод Марквардта

Даний метод є комбінацією методів Коші та Ньютона, 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 Ньютона. Ідея об'єднання методів Коші та Ньютона була покладена в основу алгоритму, розробленого Марквардтом. Згідно цього методу напрямок пошуку визначається рівнянням:

$$S^{(k)} = -\left[H^{(k)} + \alpha^{(k)} \cdot I\right]^{-1} \cdot \nabla f(x)^{(k)} . \qquad (4.15)$$

При цьому в формулі (4.1) 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

$$\left[H^{(0)} + \lambda^{(0)} \cdot I\right]^{-1} = \left[\lambda^{(0)} \cdot I\right]^{-1} = \frac{1}{\lambda^{(0)}} \cdot I . \qquad (4.16)$$

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

$$S^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)}) . \qquad (4.17)$$

З виразу (4.14) можна заключити, що при зменшенні λ до 0 $S(x)$ змінюється від напрямку, протилежному 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 К = 0, $\lambda^{(0)} = 10^4$.

Крок 3. Обчислити $\nabla f(x^{(\kappa)})$

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

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

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

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

Крок 6. Обчислити $S(x^{(к)})$ за формулою (4.16).

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

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

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

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

Крок 10. Покласти $\lambda^{(К+1)}= 2\,\lambda^{(к)}$. 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 (4.16). Цей метод широко використається при рішенні задач, у яких f(x) записується у вигляді суми повних квадратів. Задача такого типу виникає, наприклад, у регресійному аналізі:

$$f(x) = f_1^2(x) + f_2^2(x) + \ldots + \ldots + f_m^2(x) \qquad (4.18)$$

Метод Марквардта відрізняється високою ефективністю при рішенні задач такого типу.

4.2 Порядок виконання роботи

4.2.1 Написати програму, що реалізує один з градієнтних методів багатовимірної оптимізації.

4.2.2 За допомогою розробленої програми знайти мінімум функції (табл.. 1.1).

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

4.3 Зміст звіту

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

4.4 Контрольні питання

4.4.1 Які недоліки має метод Коші?
4.4.2 Які переваги методу Коші?
4.4.3 Властивості методу Ньютона.
4.4.4 Що покладено в основу методу Марквардта?

ЛІТЕРАТУРА

1. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер с англ..- М.: Радио и связь, 1988.-128 с.

2. Гудман С., Хидетниеми С. Введение в разработку и анализ алгоритмов.-М.: Мир, 1981.-368 с.

3. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.-534 с.

4. Аоки М. Введение в методы оптимизации. - М.: Наука, 1977. – 343 с.

5. Банди Б. Основы линейного программирования: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1989. – 176 с.

6. Вагнер Г. Основы исследования операций: в 3х т.: Пер. с англ. – М.: Мир. Т.1, 1972. – 336 с., Т.2, 1973. – 488 с., Т.3, 1973. – 502 с.

7. Вентцель Е.С. Исследование операций. - М.: Сов. радио, 1972. - 552 с.

8. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. - М.: Мир, 1985.-509 с.

9. Деннис Дж. мл., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. - М.: Мир, 1988.- 440с.

10. Зайченко Ю.П. Исследование операций. – К.: Вища школа, 1979. – 392 с.

11. Зайченко Ю.П., Шумилова С.А. Исследование операций. Сборник задач. – К.: Вища школа, 1984. – 224 с.

12. Исследование операций: Пер. с англ.: В 2х т.:/ Под ред. Дж. Моудера, С. Элмаграби. – М.: Мир, 1981. Т.1 – 712 с., Т.2 – 678 с.

13. Моисеев Н.Н., Иванилов Ю.П., Столярова Е.М. Методы оптимизации. - М.: Наука, 1978. - 352 с.

14. Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. - М.:Наука, 1975.- 319 с.

15. Таха, Хэмди А. Введение в исследование операций: В 2х кн.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1985. кн. 1 – 479 с., кн. 2 – 496 с.