

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ ТА НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

**МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ
ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ З КУРСУ
«ДОСЛІДЖЕННЯ ОПЕРАЦІЙ»**

для студентів, які навчаються за спеціальностями
121 «Інженерія програмного забезпечення» та
122 «Комп'ютерні науки»

Затверджено
редакційно-видавничою радою НТУ «ХПІ»,
протокол № 2 від 24 травня 2018 р.

Харків
НТУ «ХПІ»
2018

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу «Дослідження операцій» для студентів, які навчаються за спеціальностями 121 Інженерія програмного забезпечення та 122 Комп'ютерні науки та інформаційні технології / укладачі: В. О. Гужва, Н. К. Стратієнко, І. О. Бородіна. – Харків : НТУ «ХПІ», 2018. – 55 с.

Укладачі: В. О. Гужва
Н. К. Стратієнко
І. О. Бородіна

Рецензент проф. Гамбаров Л. А.

Кафедра програмної інженерії та інформаційних технологій управління

ЗМІСТ

Вступ	5
Загальні рекомендації щодо проведення лабораторних робіт	6
Лабораторна робота 1. Методи одномірної мінімізації.....	8
1.1. Унімодальність функції.....	8
1.2. Метод дихотомії.....	9
1.3. Метод «золотого перетину».....	10
1.4. Метод Фібоначчі	11
1.5. Метод квадратичної апроксимації	13
1.6. Метод пошуку і використання кубічної апроксимації.....	15
1.7. Завдання на лабораторну роботу.....	17
1.8. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи.....	18
1.9. Контрольні запитання.....	19
Лабораторна робота 2. Методи безумовної оптимізації нульового порядку	20
2.1. Основні визначення	20
2.2. Класифікація методів.....	21
2.3. Загальна характеристика методів нульового порядку	22
2.4. Алгоритм циклічного покоординатного спуску	23
2.5. Метод Хука – Дживса.....	24
2.6. Метод Розенброка	26
2.7. Метод деформованого багатогранника.....	28
2.8. Завдання на лабораторну роботу.....	30
2.9. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи.....	31
2.10. Контрольні запитання.....	33
Лабораторна робота 3. Чисельні методи безумовної оптимізації першого порядку	34
3.1. Короткі відомості	34
3.2. Градієнтні методи	35

3.3. Методи спряжених градієнтів.....	38
3.4. Завдання на лабораторну роботу.....	41
4.5. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи.....	42
3.6. Контрольні запитання.....	43
Лабораторна робота 4. Чисельні методи безумовної оптимізації	
другого порядку	44
4.1. Короткі відомості	44
4.2. Алгоритм методу Ньютона	46
4.3. Метод Левенберга – Марквардта	47
4.4. Методи змінної метрики.....	48
4.5. Завдання на лабораторну роботу.....	51
4.6. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи.....	52
4.7. Контрольні запитання.....	53
Список літератури	54

ВСТУП

Складність завдань дослідження операцій, що виникають при створенні ефективного програмного забезпечення інформаційних управляючих систем та технологій, систем підтримки прийняття рішень, вимагає не тільки глибоких знань студентами методологічних і теоретичних основ, але і стійких практичних навичок рішення з використанням сучасних технологій і обчислювальних засобів реальних завдань дослідження операцій.

Виходячи з цього, навчальними планами підготовки бакалаврів за спеціальностями 121 «Інженерія програмного забезпечення» та 122 «Комп'ютерні науки» велика увага приділяється вирішенню практичних задач дослідження операцій, формування оптимальних стратегій їх проведення.

У першому розділі методичних вказівок наведені загальні рекомендації з проведення лабораторних занять. Далі для кожної теми лабораторних робіт наведені теоретичний вступ, що містить опис методів вирішення завдань, подані запитання для самоперевірки, індивідуальні завдання для лабораторних робіт, а також вимоги для оформлення звітів.

ЗАГАЛЬНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ПРОВЕДЕННЯ ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ

План проведення лабораторних робіт наведено в таблиці 1.

Таблиця 1 – План проведення лабораторних робіт

Назва лабораторної роботи	Кількість годин
Лабораторна робота 1. «Одновимірні методи безумовної оптимізації»	4
Лабораторна робота 2. «Багатовимірні методи безумовної оптимізації нульового порядку»	4
Лабораторна робота 3. «Багатовимірні методи безумовної оптимізації першого порядку»	4
Лабораторна робота 4. «Багатовимірні методи безумовної оптимізації другого порядку»	4

На початку кожного лабораторного заняття студентам пропонуються запитання для самоконтролю. Ці запитання дозволяють не тільки перевірити рівень засвоєння теоретичного матеріалу, але й зв'язати вивчений матеріал з практикою дослідження операцій.

На початку навчального семестру кожний студент академічної групи отримує комплексне завдання на виконання лабораторних робіт, призначене для закріплення навиків вирішення задач нелінійної оптимізації.

Відповідно до номера в журналі академічної групи на кожну лабораторну роботу студент обирає функцію та методи її дослідження (табл. 2).

За результатом виконання кожної лабораторної роботи студент формує звіт відповідно до вимог НТУ «ХПІ» щодо оформлення навчальної документації.

Здача лабораторних робіт відбувається протягом всього навчального семестру у відповідності до графіку їх проведення. Строк здачі комплексу лабораторних робіт – до останнього тижня семестру.

Таблиця 2 – Варіанти завдань до лабораторних робіт

№ студента з/с	Номер функції	Номери методів для лаб. роботи 1	Номер методу для лаб. роботи 2	Номер методу для лаб. роботи 3	Номер методу для лаб. роботи 4
1	Номер функції відповідає порядковому номеру студента	2,3	1	3	3
2		2,4	2	2	2
3		2,5	3	1	1
4		1,4	4	3	3
5		1,5	4	2	2
6		2,3	3	1	1
7		2,4	2	1	1
8		3,5	1	2	2
9		2,5	1	3	3
10		1,5	3	2	2
11		2,3	4	1	1
12		2,5	4	1	1
13		1,3	2	3	3
14		1,3	1	1	1
15		1,4	1	2	2
16		2,3	2	3	3
17		2,4	3	3	3
18		3,5	4	2	2
19		2,5	1	1	1
20		3,4	1	3	3
21		1,5	2	2	2
22		2,3	3	1	1
23		2,4	3	3	3
24		3,5	4	2	2

Цілі виконання лабораторних робіт наступні:

- формування практичних навичок організації та використання при вирішенні завдань дослідження функцій (операцій);
- вивчення найбільш поширених методів оптимізації алгоритмів розв'язання задач з використанням.

Завдання можна виконувати мовою програмування на вибір.

Лабораторна робота 1. МЕТОДИ ОДНОМІРНОЇ МІНІМІЗАЦІЇ

Мета роботи – вивчити одномірні методи оптимізації, мінімізувати функцію, задану викладачем, двома методами; порівняти результати оптимізації і видати рекомендації щодо застосування досліджуваних методів.

1.1. Унімодальність функції

Перш ніж приступити до оптимізації функції, необхідно визначити, до якого класу функцій вона належить. Всі досліджувані методи в даній лабораторній роботі застосовуються до унімодальних функцій. Унімодальні функції на заданому інтервалі мають єдиний мінімум. Точне визначення унімодальної функції таке: нехай $x_1 \in [a, b]$, $x_2 \in [a, b]$ – будь-які дві точки, при яких $x_1 < x_2$. Тоді функція $f(x)$ унімодальна, якщо з умови $x_1 > x_*$ виходить, що $f(x_1) < f(x_2)$, а з умови $x_2 < x_*$ виходить, що $f(x_1) > f(x_2)$. При цьому не потрібно диференційованості і навіть безперервності функції $f(x)$. Введене визначення справедливо і для функції з розривами і зламами. З визначення також випливає, що унімодальна функція не може мати ділянок, де вона постійна. Прикладом унімодальної функції може слугувати сильно опукла функція на інтервалі $[a, b]$. Властивість унімодальності дозволяє за результатами будь-якої пари експериментів вказати інтервал, в якому закладено значення x_* , вузчий, ніж початковий.

При вирішенні практичних завдань в більшості випадків функції не унімодальні. В цьому випадку рекомендується такий підхід. Нехай задана функція однієї змінної $f(x)$, для якої допускається існування m мінімумів на інтервалі (a, b) .

Визначимо функцію:

$$F(\bar{x}) = \sum_{i=1}^m d_i(x_i),$$

де $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$;

$$d_i(x_i) = \begin{cases} f(x), & x_i \in (a_i, b_i) \\ 0, & x_i \notin (a_i, b_i) \end{cases};$$

$$\bigcup_{i=1}^m (a_i, b_i) = (a, b);$$

$d_i(x_i)$ – унімодальні функції.

За своєю побудовою функція $F(\bar{x})$ унімодальна. Для отримання рішення в цьому випадку пропонується така організація обчислень:

- 1) задання початкових значень пошуку (a_i, b_i) ;
- 2) мінімізація функції $F(\bar{x})$ по x_1, x_2, \dots, x_m , причому x_i змінюється в своєму інтервалі;
- 3) аналіз результатів мінімізації, при необхідності коригування початкових значень, (a_i, b_i) і повернення до п. 2.

Повноту рішення описаної процедури забезпечують стратегії:

- випадкове задання $k \geq m$ точок на інтервалі пошуку, де m – очікуване число мінімумів функції $f(x)$. Мінімізація при цьому здійснюється ітеративно на основі ряду послідовних реалізацій випадкового розподілу точок з наступним об'єднанням результатів ітерації;
- рівномірне призначення m точок з подальшою мінімізацією і подальшим розбиттям підінтервалів пошуку під час локалізації мінімумів.

1.2. Метод дихотомії

Задача одномірної мінімізації формулюється у вигляді

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min \\ x &\in X \subset E_1. \end{aligned} \tag{1.1}$$

На кожному кроці цього методу відрізок ділиться навпіл. Та частина, в якій не може перебувати мінімум, відкидається. Нехай мінімум функції знаходиться всередині відрізка $[a, b]$. На першому кроці цей відрізок ділиться навпіл, тобто $x_1 = \frac{a+b}{2}$. Щоб визначити, з якого боку від цієї точки знахо-

диться мінімум, можна обчислити значення функції в точках $x_1 - \frac{\varepsilon}{2}$ та $x_1 + \frac{\varepsilon}{2}$, де ε – задана точність обчислень.

Якщо $f\left(x_1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) > f\left(x - \frac{\varepsilon}{2}\right)$, то точка мінімуму знаходиться зліва від x_1 , і потрібно відкинути праву частину відрізка, в іншому випадку відкидається ліва частина. Відрізок, що залишився, також ділиться навпіл і проводяться аналогічні обчислення. Процес пошуку мінімуму триває задане число раз або до тих пір, поки відрізок, що містить точку мінімуму, не стане менше або рівним ε .

Послідовність операцій на k -му кроці методу дихотомії виглядає наступним чином:

Крок 1. Визначається $x_1^k = \frac{a_k + b_k}{2}$.

Крок 2. Розраховується $f_1^k = f\left(x_1^k - \frac{\varepsilon}{2}\right)$ та $f_2^k = f\left(x_1^k + \frac{\varepsilon}{2}\right)$.

Крок 3. Проводиться порівняння отриманих значень функції:

Якщо $f_1^k > f_2^k$, то $a_{k+1} = x_1^k$, а $b_{k+1} = b_k$.

Якщо $f_1^k < f_2^k$, то $a_{k+1} = a_k$ та $b_{k+1} = x_1^k$.

Крок 4. Аналізується закінчення рішення:

Якщо $b_{k+1} - a_{k+1} > \varepsilon$, то переходять до наступної ітерації, починаючи з кроку 1.

Якщо $b_{k+1} - a_{k+1} \leq \varepsilon$, то $x_* = \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$.

1.3. Метод «золотого перетину»

Для визначення інтервалу невизначеності $[a_{k+1}, b_{k+1}]$ необхідно обчислити значення функції $f(x)$ в двох точках x_1^k, x_2^k .

На відміну від методу дихотомії, ці точки розташовані симетрично щодо граничних значень попереднього інтервалу невизначеності $[a_k, b_k]$. А вибір значень змінних x_1^k і x_2^k здійснюється таким чином, що відношення довжини відрізка $b_k - a_k$ до більшої його частини $x_2^k - a_k$, дорівнює відношенню цієї більшої частини до меншої

$$\tau = \frac{b_k - a_k}{x_2^k - a_k} = \frac{x_2^k - a_k}{x_1^k - a_k} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \cong 1,618. \quad (1.2)$$

Такий поділ відрізка на дві нерівні частини в геометрії називають золотим перетином.

Точки x_1^k та x_2^k обчислюються за формулами:

$$x_1^k = a_k + \alpha_1(b_k - a_k),$$

$$x_2^k = a_k + \alpha_2(b_k - a_k),$$

де $\alpha_1 = \frac{3-\sqrt{5}}{2} \cong 0,382$, $\alpha_2 = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \cong 0,618$.

Важливим наслідком співвідношення (1.2) є те, що двократне обчислення функції $f(x)$ потрібне лише при визначенні першого інтервалу невизначеності $[a_1, b_1]$. При виборі всіх послідовних інтервалів потрібен лише один експеримент з наведених на етапі визначення попереднього інтервалу невизначеності.

Алгоритм методу представляється у вигляді послідовності кроків.

Початковий етап.

Вибираємо кінцеву довжину інтервалу невизначеності $\varepsilon > 0$.

Розраховуємо

$$x_1^0 = a_0 + (1-\alpha)(b_0 - a_0), x_2^0 = a_0 + \alpha(b_0 - a_0) \text{ та } f(x_1^0), f(x_2^0).$$

Тут $\alpha = 0.618$. Вважаємо $k = 1$.

Основний етап.

Крок 1. Якщо $b_k - a_k < \varepsilon$, то оптимальна точка належить інтервалу $[a_k, b_k]$ Обчислити $x_* = \frac{a_k + b_k}{2}$ та $f(x_*)$, зупинити обчислення. В іншому випадку, якщо $f(x_1^k) > f(x_2^k)$, то йти до кроку 2, а якщо $f(x_1^k) \leq f(x_2^k)$, то до кроку 3.

Крок 2. Покласти $a_{k+1} = x_1^k$, $b_{k+1} = b_k$, $x_1^{k+1} = x_2^k$, $f(x_1^{k+1}) = f(x_2^k)$. Обчислити $x_2^{k+1} = a_{k+1} + \alpha(b_{k+1} - a_{k+1})$ та $f(x_2^{k+1})$. Перейти до кроку 4.

Крок 3. Покласти $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = x_2^k$, $x_2^{k+1} = x_1^k$, $f(x_2^{k+1}) = f(x_1^k)$. Обчислити $x_1^{k+1} = a_{k+1} + (1-\alpha)(b_{k+1} - a_{k+1})$ та $f(x_1^{k+1})$. Перейти до кроку 4.

Крок 4. Замінити k на $k+1$ та перейти до кроку 1.

1.4. Метод Фібоначчі

Цей метод є трохи ефективнішим, ніж метод «золотого перетину».

Як і в методі «золотого перетину», для вибору поточного інтервалу невизначеності $[a_{k+1}, b_{k+1}]$ значення функції $f(x)$ обчислюється в двох точках x_1^k, x_2^k попереднього інтервалу $[a_k, b_k]$, розташованих симетрично щодо його граничних точок a_k, b_k . Метод Фібоначчі оснований на використанні чисел Фібоначчі, які дозволяють побудувати послідовність відрізків $[a_k, b_k]$, що стягуються до точки x_* мінімуму функції $f(x)$ на вихідному відрізку $[a_0, b_0]$. Числа Фібоначчі визначаються з рекурентного співвідношення $F_1 = F_2 = 1; F_{k+2} = F_{k+1} + F_k$. Цей метод має таку властивість, що при заданому числі кроків m він забезпечує мінімальну довжину відрізка $[a_m, b_m]$, що містить точку x_* .

Алгоритм методу Фібоначчі складається з такої послідовності кроків:

Початковий етап.

Крок 1. Вибрати число $\varepsilon > 0$ – точність обчислення точки мінімуму функції $f(x)$ на відрізку $[a_0, b_0]$, покласти $F_1 = F_2 = 1$.

Крок 2. Покласти $j = 1$.

Крок 3. Обчислити $F_{j+2} = F_{j+1} + F_j$.

Крок 4. Якщо $F_{j+1} < \frac{1}{\varepsilon}(b_0 - a_0) \leq F_{j+2}$ то покласти $m = j$ та перейти до кроку 5, інакше покласти $j = j + 1$ та перейти до кроку 3.

Крок 5. Обчислити точки:

$$x_1' = a_0 + \frac{F_m}{F_{m+2}}(b_0 - a_0), \quad x_2' = a_0 + \frac{F_{m+1}}{F_{m+2}}(b_0 - a_0), \quad f(x_1'), f(x_2')$$

Крок 6. Якщо $f(x_1') \leq f(x_2')$ то покласти $a_1 = a_0, b_1 = x_2'$ й перейти до кроку 7, інакше покласти $a_1 = x_1', b_1 = b_0$ й перейти до кроку 7.

Крок 7. Покласти $k = 1$.

Основний етап.

Крок 8. Якщо $f(x_1^k) \leq f(x_2^k)$ то покласти $x_2^{k+1} = x_1^k, f(x_2^{k+1}) = f(x_1^k)$ й перейти до кроку 9, інакше покласти $x_1^{k+1} = x_2^k, f(x_1^{k+1}) = f(x_2^k)$ й перейти до кроку 10.

Крок 9. Обчислити точку $x_1^{k+1} = a_k + \frac{F_{m-k}}{F_{m+2}}(b_0 - a_0)$ і значення функції $f(x_1^{k+1})$. Перейти до кроку 11.

Крок 10. Обчислити точку $x_2^{k+1} = a_k + \frac{F_{m-k+1}}{F_{m+2}}(b_0 - a_0)$ і значення функції $f(x_2^{k+1})$. Перейти до кроку 11.

Крок 11. Якщо $f(x_1^{k+1}) \leq f(x_2^{k+1})$, то покласти $a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = x_2^{k+1}$ й перейти до кроку 12, інакше покласти $a_{k+1} = x_1^{k+1}, b_{k+1} = b_k$ й йти до кроку 12.

Крок 12. Якщо $k < m-1$, то покласти $k = k+1$ й йти до кроку 8, інакше покласти $x_* = \frac{a_m + b_m}{2}$ й обчислити $f(x_*)$. Закінчити обчислення.

1.5. Метод квадратичної апроксимації

Методи поліноміальної апроксимації в ряді випадків виявляються більш ефективними, ніж раніше розглянуті методи виключення інтервалів. Однак вииграш в ефективності досягається ціною введення додаткової умови, згідно з якою досліджувані функції повинні бути достатньо гладкими.

Основна ідея досліджуваних методів пов'язана з можливістю апроксимації гладкої функції поліномом і подальшого його використання для оцінювання координати точки континууму. Необхідними умовами ефективної реалізації такого підходу є унімодальність і безперервність досліджуваної функції.

Найпростішим варіантом поліноміальної апроксимації є квадратична апроксимація.

Нехай задана послідовність точок x_1, x_2, x_3 і відомі відповідні цим точкам значення функції f_1, f_2, f_3 . Необхідно побудувати квадратичний поліном $q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$, значення якого в точках x_1, x_2, x_3 збігаються зі значеннями f_1, f_2, f_3 . Для цього необхідно визначити коефіцієнти a_0, a_1, a_2 з умов:

$$f_1 = f(x_1) = q(x_1) = a_0;$$

$$a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1};$$

$$a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2} \left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right).$$

Якщо точність апроксимації досліджуваної функції в інтервалі від x_1 до x_3 за допомогою квадратичного полінома виявляється досить високою, то побудований поліном можна використовувати для оцінювання координати точки оптимуму. Точку оптимуму можна визначити з умови

$$\frac{dq}{dx} = a_1 + a_2(x - x_2) + a_2(x - x_1) = 0. \quad (1.3)$$

Оскільки функція $f(x)$ на розглянутому інтервалі має властивість уні-
модальності, а апроксимуючий квадратичний поліном також є унімодальною
функцією, то можна очікувати, що величина \bar{x} стане прийнятною оцінкою
координати точки істинного оптимуму x_* .

Алгоритм методу квадратичної апроксимації можна подати у вигляді
послідовності кроків.

Нехай відома початкова точка x_1 , і обрано Δx – величину кроку по
осі x_* .

Крок 1. Обчислити $x_2 = x_1 + \Delta x$.

Крок 2. Обчислити $f(x_1)$ і $f(x_2)$.

Крок 3. Якщо $f(x_1) > f(x_2)$, то покласти $x_3 = x_1 + 2\Delta x$. Якщо
 $f(x_1) \leq f(x_2)$ покласти $x_3 = x_1 - \Delta x$.

Крок 4. Обчислити $f(x_3)$ і знайти $F_{\min} = \min\{f_1, f_2, f_3\}$, $x_{\min} = x_i$.

Крок 5. За трьома точками x_1, x_2, x_3 обчислити \bar{x} , використовуючи
формулу для оцінювання за допомогою квадратичної апроксимації.

Крок 6. Перевірка на закінчення пошуку:

1) чи є різниця $|F_{\min} - f(\bar{x})|$ достатньо малою?

2) чи є різниця $|x_{\min} - \bar{x}|$ достатньо малою?

Якщо обидві умови виконуються, закінчити пошук. В іншому випадку
перейти до кроку 7.

Крок 7. Вибрати «найкращу» точку (x_{\min} або \bar{x}) та дві точки по обидва
боки від неї. Позначити ці точки в природному порядку і перейти до кроку 4.

При першій реалізації кроку 5 межі інтервалу, що містить точку мінімуму, необов'язково виявляються установленими. При цьому отримана точка \bar{x} може перебувати за точкою x_3 . Для того щоб виключити можливість занадто великого експлуатаційного переміщення, після кроку 5 слід провести додаткову перевірку і у випадку, якщо точка \bar{x} знаходиться занадто далеко від x_3 , замінити \bar{x} точкою, координата якої обчислюється з урахуванням заздалегідь встановленої довжини кроку.

1.6. Метод пошуку і використання кубічної апроксимації

Функція $f(x)$, яку необхідно мінімізувати, апроксимується поліномом третього порядку. Логічна схема методу аналогічна схемі методу з використанням квадратичної апроксимації. Оскільки передбачається, що в кожній точці можна обчислювати функцію і похідну, то побудова апроксимуючого полінома проводиться на основі меншого числа точок.

Апроксимуюча кубічна функція записується в такому вигляді:

$$q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2(x - x_2).$$

Параметри a_0, a_1, a_2, a_3 визначаються таким чином, щоб значення $q(x)$ і її похідної в точках x_1 і x_2 збігалися зі значеннями $f(x)$ і $f'(x)$ в цих точках. Похідна від функції $q(x)$:

$$\frac{dq(x)}{dx} = a_1 + a_2(x - x_1) + a_2(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2 + 2a_3(x - x_1)(x - x_2).$$

Параметри a_0, a_1, a_2, a_3 визначаються за відомими значеннями $f(x_1)$, $f(x_2)$, $f'(x_1)$, $f'(x_2)$ шляхом розв'язання системи лінійних рівнянь

$$\begin{aligned} f_1 &= f(x_1) = a_0; \\ f_2 &= f(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x_1); \\ f'_1 &= f'(x_1) = a_1 + a_2(x_1 - x_2); \\ f'_2 &= f'(x_2) = a_1 + a_2(x_2 - x_1)^2. \end{aligned}$$

Ця система розв'язується рекурсивним методом. Після визначення параметрів апроксимуючого многочлена визначається стаціонарна точка \bar{x} з рівняння $\frac{dq(x)}{dx} = 0$. В результаті отримаємо:

$$\bar{x} = \begin{cases} x_2, & \text{якщо } \mu < 0, \\ x_2 - \mu(x_2 - x_1), & \text{якщо } 0 \leq \mu \leq 1, \\ x_1, & \text{якщо } \mu > 1 \end{cases} \quad (1.4)$$

$$\text{де } \mu = \frac{f'_2 + \omega - z}{f'_2 - f'_1 + 2\omega};$$

$$z = \frac{3(f_1 - f_2)}{x_2 - x_1} + f'_1 + f'_2;$$

$$\omega = \begin{cases} (z^2 - f'_1 f'_2)^{\frac{1}{2}}, & \text{якщо } x_1 < x_2 \\ -(z^2 - f'_1 f'_2)^{\frac{1}{2}}, & \text{якщо } x_1 > x_2. \end{cases}$$

Формула для ω забезпечує належний вибір одного з двох коренів квадратного рівняння; для значень μ від 0 до 1, формула для \bar{x} гарантує, що отримується точка \bar{x} розташована між x_1 і x_2 . Потім знову вибираються дві точки для реалізації процедури кубічної апроксимації x_2 і одна з точок x_1 або x_2 , причому значення похідної досліджуваної функції в цих точках повинні бути протилежними за знаком і процедура кубічної апроксимації повторюється.

Алгоритм методу кубічної апроксимації можна представити у вигляді послідовності наступних кроків:

Нехай задані початкова точка x_0 , позитивна величина кроку Δ і параметри збіжності ε_1 й ε_2 .

Крок 1. Обчислити $f'(x_0)$.

Якщо $f'(x_0) < 0$, обчислити $x_{k+1} = x_k + 2^k \cdot \Delta$ для значень $k = 0, 1, \dots$

Якщо $f'(x_0) > 0$, обчислити $x_{k+1} = x_k - 2^k \cdot \Delta$ для значень $k = 0, 1, \dots$

Крок 2. Обчислити значення $f'(x_0)$ в точках x_{k+1} при $k = 0, 1, \dots$ до точки x_m , в якій $f'(x_{m-1})f'(x_m) \leq 0$. Потім покласти $x_1 = x_{m-1}$, $x_2 = x_m$. Обчислити f_1, f_2, f'_1, f'_2 .

Крок 3. Знайти стаціонарну точку \bar{x} апроксимуючого кубічного поліному, користуючись формулою (1.4).

Крок 4. Якщо $f(\bar{x}) < f(x_1)$, перейти до кроку 5. В іншому випадку обчислювати \bar{x} за формулою $\bar{x} = \bar{x} + \frac{1}{2}(\bar{x} - x_1)$ до тих пір, поки не буде виконуватися нерівність $f(\bar{x}) < f(x_1)$.

Крок 5. Перевірка на закінчення пошуку.

Якщо $|f'(\bar{x})| \leq \varepsilon_1$ та $\left| \frac{(\bar{x} - x_1)}{\bar{x}} \right| \leq \varepsilon_2$, пошук закінчити.

Інакше покласти:

або $x_2 = x_1$ і $x_1 = \bar{x}$, якщо $f'(\bar{x})f'(x_1) < 0$;

або $x_1 = \bar{x}$, якщо $f'(\bar{x})f'(x_2) < 0$.

Потім перейти до кроку 3.

Кроки 1 і 2 реалізують процедуру пошуку меж інтервалу за евристичним методом, причому зміна знаку похідної використовується в якості критерію переходу через точку оптимуму.

Зауважимо, що якщо похідна від функції обчислюється з використанням аналітичного виразу, то цей метод є більш ефективним, ніж будь-який із наведених вище методів пошуку. Однак, якщо значення похідної обчислюються шляхом різничного диференціювання, то перевагу слід віддати методу, заснованому на квадратичній апроксимації.

1.7. Завдання на лабораторну роботу

Вихідною інформацією для виконання лабораторної роботи є:

- два методи;
- функція, що оптимізується;
- точність, з якою повинна бути отримана оптимальна точка.

В методі Фібоначчі може задаватися кількість необхідних ітерацій; для функції, що оптимізується, задається початковий інтервал невизначеності та характер точки екстремуму.

Варіанти завдань наведені в таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Варіанти завдань до лабораторної роботи

Номер варіанту	Вид функції	Інтервал невизначеності	Характер екстремуму
1	2	3	4
1	$f(x) = \sqrt[3]{x^2 - x}$	[0,1]	max
2	$f(x) = 4x \sin x$	[0, π]	min
3	$f(x) = e^x + e^{-x} - 2 \sin x$	[0,5; 0,5]	min
4	$f(x) = 2(x - 3)^2 + e^{\frac{x^2}{2}}$	[0; 100]	min
5	$f(x) = \frac{\sin^2 x}{2 + \sin x}$	[1,2 π ; 1,8 π]	min
6	$f(x) = \frac{x^3 + x}{x^4 - x^2 + 1}$	[0; 2]	min
7	$f(x) = -2(x + 1)e^{-x} + 2 \cos x - x$	$\left[0; \frac{\pi}{6}\right]$	min
8	$f(x) = \frac{\sqrt[3]{(x - 1)^2}}{x^2 + 1}$	[0,2; 1,5]	min

Продовження табл. 1.1

1	2	3	4
9	$f(x) = 5e^{-x} + 4x - \frac{x^3}{3}$	$[0; 0,5]$	min
10	$f(x) = -x^3(x+1)\sqrt[3]{x-2}$	$[-0,5; 0,5]$	max
11	$f(x) = x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$	$[0; 0,5]$	min
12	$f(x) = \sqrt[3]{x^2 - 3x + 2}$	$[-1; 2]$	min
13	$f(x) = -\sqrt[3]{x^2} - \sqrt[3]{1-x^2}$	$[0,2; 0,95]$	max
14	$f(x) = \ln \cos x + \cos x$	$\left[-\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{4}\right]$	max
15	$f(x) = \sin^3 x + \cos^3 x$	$[0,9; 2]$	max
16	$f(x) = (x-1)^2(x+1)^4(x-2)^3$	$[-0,5; 0,5]$	min
17	$f(x) = x^2 \ln(x+2)$	$[-1; 0]$	max
18	$f(x) = x^3 - 3\sin x$	$[-0,5; 1]$	min
19	$f(x) = 0,5x^2 - \sin x$	$[0; 1]$	min
21	$f(x) = x^2 + 5e^{-0,05x}$	$[-2; 2]$	min
22	$f(x) = -4x + e^{ x-0,2 }$	$[-2; 2]$	min
23	$f(x) = (5 - x)(x + 1)$	$[0; 5]$	max
24	$f(x) = 3x^2 + \frac{12}{x^3} - 5$	$[0,5; 2,5]$	min
25	$f(x) = x^2(x+1)\sqrt[3]{(x-2)}$	$[-0,5; 0,5]$	max
26	$f(x) = x^2(x-2)(x+1)$	$[1; 2]$	min
27	$f(x) = (x^2 - 2x)\ln x - \frac{3}{2}x^2 + 4x$	$[2; 4]$	min
28	$f(x) = -0,2x^5 + x + 4$	$[-1,5; -0,2]$	min
29	$f(x) = -2(x+1)e^{-x} - 2\cos x - x$	$\left[0; \frac{\pi}{6}\right]$	min
30	$f(x) = \sqrt{(1+x^2)} + e^{-2x}$	$[0; 1]$	min

1.8. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи

Під час виконання лабораторної роботи необхідно дотримуватись такої послідовності кроків:

- 1) вивчити методи одномірної оптимізації;
- 2) побудувати діаграми діяльності алгоритмів запропонованих методів;
- 3) мінімізувати одну із функцій, наведених у таблиці 1.1 двома методами, заздалегідь визначеними викладачем;
- 4) побудувати графік зміни довжини інтервалу невизначеності в залежності від номеру ітерації;
- 5) порівняти результати, отримані різними методами:
 - за кількістю ітерацій, які необхідно виконати для досягнення наперед заданої точності обчислень;

- за затратами машинного часу, необхідного для рішення задачі;
- за кількістю обчислень функції.

В звіт до лабораторної роботи необхідно включити:

- 1) мету роботи;
- 2) алгоритми досліджуваних методів;
- 3) діаграми діяльності алгоритмів;
- 4) програмний код;
- 5) результати оптимізації, графіки;
- 6) висновки.

1.9. Контрольні запитання

1. До яких типів функцій можна застосувати методи дихотомії, золотого перетину і Фібоначчі?
2. Який підхід для пошуку екстремуму функції можна застосувати, якщо функція не унімодальна?
3. Що спільного між методами дихотомії, золотого перетину і Фібоначчі?
4. У чому суть методу дихотомії?
5. Що називається «золотим перерізом» відрізка?
6. У чому суть методу золотого перетину?
7. Що таке числа Фібоначчі, як вони обчислюються?
8. У чому полягає основна ідея методів квадратичної і кубічної апроксимації?
9. Як здійснюється перевірка пошуку в методі квадратичної апроксимації?

Лабораторна робота 2. МЕТОДИ БЕЗУМОВНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ НУЛЬОВОГО ПОРЯДКУ

2.1. Основні визначення

Рішення багатьох практичних задач зводиться до пошуку екстремуму скалярної функції $f(x)$ векторного аргументу x . Надалі без обмеження загальності будемо говорити про пошук мінімального значення функції $f(x)$ і записувати цю задачу в такий спосіб:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min \\ x &\in E_n \end{aligned}$$

Вектор \bar{x}_* , який доставляє мінімум цільової функції, називають точкою мінімуму.

Відзначимо, що завдання максимізації функції $f(x)$ можна замінити еквівалентною їй задачею мінімізації. Для цього необхідно перед функцією поставити знак мінус, тобто максимум функції $f(x)$ і мінімум функції $-f(x)$ досягається при одному і тому ж значенні змінної.

В реальних умовах на змінні $x_i, i = \overline{1, n}$, і деякі функції $q_i(x), h_j(x)$, що характеризують якісні властивості об'єкту системи, процесу, можуть бути накладені обмеження виду:

$$\begin{aligned} q_i(x) &= 0, i = \overline{1, m}; \\ h_j(x) &\leq 0, j = \overline{1, p}; \\ a_i &\leq x_i \leq b_i, i = \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Задачу мінімізації функції $f(x)$ при наявності вказаних вище обмежень називають задачею умовної оптимізації. При відсутності обмежень має місце задача безумовної оптимізації. Точка $x_* \in X$ може бути точкою локального або глобального мінімуму. Якщо виконується нерівність $f(x_*) \leq f(x)$ для всіх $x_* \in X$, то точка x_* називається глобальним мінімумом функції $f(x)$. Якщо ця нерівність виконується як суворі нерівності для всіх $x \in E_n$, то точка x_* буде точкою строгого глобального мінімуму. Точка $x_* \in X$ доставляє локальний мінімум функції $f(x)$ на множину X , якщо при деякому досить малому $\varepsilon > 0$ для всіх $x \neq x_*, x \in X$, що задовольняють умові $|x - x_*| \leq \varepsilon$, виконується нерівність $f(x_*) \leq f(x)$. Якщо нерівність строга, то x_* є точкою

строого локального мінімуму. Всі визначення для максимуму функції отримуються заміною знаків попередніх нерівностей на протилежні.

2.2. Класифікація методів

Можливі два підходи до вирішення задачі пошуку мінімуму функції багатьох змінних $f(x) = f(x_1 \dots x_n)$, при відсутності обмежень на діапазон зміни невідомих. Перший підхід лежить в основі непрямих методів оптимізації і зводить рішення задачі оптимізації до вирішення системи нелінійних рівнянь, які є наслідком умов екстремуму функції багатьох змінних. Ці умови визначають, що в точці екстремуму x_* всі перші похідні функції по незалежним змінним дорівнюють нулю:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{x = x_*} = 0, i = \overline{1, n}.$$

Ці умови утворюють систему n нелінійних рівнянь, серед рішень якої знаходяться точки мінімуму. Рішення систем нелінійних рівнянь – задача досить складна і трудомістка. Тому на практиці використовують інший підхід до мінімізації функцій, що становить основу прямих методів. Суть їх полягає в побудові послідовності векторів x^0, x^1, \dots, x^k , таких що

$$f(x^0) > f(x^1) > \dots > f(x^k).$$

За початкову точку може бути обрана довільна точка, проте прагнуть використовувати всю наявну інформацію про поведінку функції $f(x)$, щоб точка x^0 розташовувалася якомога ближче до точки мінімуму. Перехід від точки x^k до точки x^{k+1} , $k = 0, 1, 2 \dots$ складається з двох етапів:

- 1) вибір напрямку руху з точки x^k ;
- 2) визначення кроку уздовж цього напрямку.

Методи побудови таких послідовностей часто називають методами спуску, так як здійснюється перехід від більших значень функції до менших.

Математично методи спуску описуються співвідношенням

$$x^{k+1} = x^k + \lambda_k \overline{p^k}, k = 0, 1, 2, \dots,$$

де $\overline{p^k}$ вектор, що визначає напрям спуску;

λ_k – довжина кроку.

В координатній формі:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \lambda_k p_i^k, i = \overline{1, n}.$$

Різні методи спуску відрізняються один від одного способами вибору двох параметрів – напрямку спуску і довжини кроку уздовж цього напрямку. У методах спуску вирішення задачі теоретично виходить за нескінченне число ітерацій. На практиці обчислення припиняються при виконанні деяких критеріїв зупинки ітераційного процесу. Наприклад, це може бути умова

$$\|x^k - x^{k-1}\| \leq \varepsilon$$

або

$$|f(x^k) - f(x^{k-1})| < r,$$

де k – номер ітерації;

ε, r – задані величини точності рішення задачі.

Методи пошуку точки мінімуму називаються детермінованими, якщо напрямки руху і величина кроку вибираються однозначно за доступною в точці x^k інформацією. Якщо ж при переході використовується будь-який випадковий механізм, то алгоритм пошуку називається випадковим пошуком мінімуму.

Детерміновані алгоритми безумовної мінімізації ділять на класи в залежності від виду використовуваної інформації. Якщо на кожній ітерації використовуються лише значення функцій, що мінімізуються, то метод називається методом нульового порядку. Якщо крім того, потрібно обчислення перших похідних функцій, що мінімізуються, то мають місце методи першого порядку, при необхідності додаткового обчислення других похідних – методи другого порядку.

Якість чисельного методу характеризується багатьма факторами; швидкістю збіжності, часом виконання однієї ітерації, об'ємом пам'яті ЕОМ, необхідним для реалізації методу, класом вирішуваних задач і т.д. Один і той самий метод, що є ефективним для розв'язання задач одного типу, може виявитись неприйнятним для задач іншого типу. Розумне поєднання різноманітних методів, облік їх властивостей дозволяє з найбільшою ефективністю вирішувати поставлені задачі.

2.3. Загальна характеристика методів нульового порядку

Напрямок мінімізації в даному випадку повністю визначається послідовними обчисленнями значень функції. При вирішенні завдань безумовної

мінімізації методи першого і другого порядків характеризуються, як правило, більш високою швидкістю збіжності, ніж методи нульового порядку. Однак на практиці обчислення перших і других похідних функцій великої кількості змінних є занадто трудомістким. В ряді випадків вони не можуть бути отримані у вигляді аналітичних функцій. Визначення похідних за допомогою різних чисельних методів здійснюється з помилками, які можуть обмежити застосування таких методів. Крім того, на практиці зустрічаються задачі, вирішення яких можливе лише за допомогою методів нульового порядку, наприклад задача мінімізації функції з розривними першими похідними. Критерій оптимальності може бути заданий не в явному вигляді, а системою рівнянь. В цьому випадку аналітичне або чисельне визначення похідних стає дуже складним, а іноді неможливим. Для рішення таких практичних задач оптимізації можуть бути успішно застосовані методи нульового порядку. Розглянемо деякі з них.

2.4. Алгоритм циклічного покоординатного спуску

Для зупинки алгоритму використовується критерій $\|x^{k+1} - x^k\|$, хоча можна застосовувати і будь-який інший критерій.

Початковий етап. Обрати число $\varepsilon > 0$, яке використовується в критерії зупинки, і взяти в якості $\lambda^1, \dots, \lambda^n$ координатні напрямки. Вибрати початкову точку x^1 та покласти $y^1 = x^1$, $k = j = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап.

Крок 1. Покласти λ_j рівним оптимальному рішенням задачі мінімізації $f(y^j + \lambda d^j)$ за умови $\lambda \in \varepsilon_1$. Покласти $y^{j+1} = y^j + \lambda_j d^j$. Якщо $j < n$, то замінити j на $j+1$ й повернутись до кроку 1. Якщо $j = n$, то перейти до кроку 2.

Крок 2. Покласти $x^{k+1} = y^{n+1}$. Якщо $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon$, то зупинитися. В іншому випадку покласти $y^1 = x^{k+1}$, $j = 1$, замінити k на $k+1$ і перейти до кроку 1.

Встановлено, що метод циклічного покоординатного спуску при мінімізації диференційованої функції сходиться до точки з нульовим значенням

градієнта. За відсутності диференційованості метод може зупинитися в неоптимальній точці.

2.5. Метод Хука – Дживса

Метод Хука – Дживса здійснює два типи пошуку – досліджуваний пошук і пошук за зразком. При заданому початковому векторі x^1 досліджуваний пошук за координатними напрямками приводить в точку x^2 , а подальший пошук за зразком в напрямку $x^2 - x^1$ приводить в точку y^1 . Потім досліджуваний пошук починається з точки y^1 і призводить в точку x^3 . Наступний етап пошуку за зразком вздовж напрямку $x^3 - x^2$ дає y^2 . Потім процес повторюється.

Хук і Дживс запропонували метод, який не містить одновимірної мінімізації, а використовує постійні кроки по напрямках пошуку. Цей варіант методу і запропонований для лабораторної роботи.

Алгоритм методу Хука – Дживса

На **початковому етапі** задаються як напрямки пошуку координатні напрямки. Необхідно також вибрати число $\varepsilon > 0$ для зупинки алгоритму, вектор початкових кроків по кожній координаті $\Delta > \varepsilon$, прискорюючий множник $\lambda > 0$ і початкове наближення x^1 . Покласти $y^1 = x^1$ і лічильники k зовнішніх і внутрішніх j ітерацій рівними одиниці, тобто $k = j = 1$. Після цього необхідно перейти до першого кроку алгоритму.

Крок 1. Обчислити $z^j = y^j + \Delta d^j$ та $f(z^j)$.

Якщо $f(z^j) < f(y^j)$, то крок вважається успішним; покласти $y^{j+1} = z^j$ й перейти до кроку 2.

Якщо $f(z^j) \geq f(y^j)$, то крок вважається невдалим, тоді необхідно обчислити $z^j = y^j - \Delta d^j$ та $f(z^j)$.

Якщо $f(z^j) < f(y^j)$, то покласти $y^{j+1} = z^j$. Інакше покласти $y^{j+1} = y^j$ та йти до кроку 2.

Крок 2. Якщо $j < n$, то замінити j на $j+1$ й перейти до кроку 1. В випадку якщо $j \geq n$ порівняти $f(y^{n+1})$ й $f(x^k)$.

Якщо $f(y^{n+1}) < f(x^k)$, то перейти до кроку 3.

Якщо $f(y^{n+1}) \geq f(x^k)$, то перейти до кроку 4.

Крок 3. Покласти $x^{k+1} = y^{n+1}$, $y^1 = x^{k+1} + \lambda(x^{k+1} - x^k)$. Покласти $k = k+1, j = 1$ та перейти до кроку 1.

Крок 4. Якщо $\Delta \leq \varepsilon$, то зупинитись, це і є рішення. Інакше замінити Δ на $\Delta/2$. Покласти $y^1 = x^k, x^{k+1} = x^k, k = k+1, j = 1$ й перейти до кроку 1.

*Алгоритм методу Хука-Дживса з використанням з використанням од-
номірної оптимізації*

Початковий етап

Вибрати як напрями координатні напрямки $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_n$. Вибрати число $\varepsilon > 0$ для зупину алгоритму. Вибрати початкову точку \bar{x}_1 , покласти $\bar{y}_1 = \bar{x}_1$, $k = j = 1$ і перейти до кроку 1 основного етапу.

Основний етап

Крок 1. Обчислити λ_j – оптимальний розв’язок

$$\min_{\lambda \in E_1} f(\bar{y}_j + \lambda \bar{d}_j)$$

і покласти $\bar{y}_{j+1} = \bar{y}_j + \lambda_j \bar{d}_j$.

Якщо $j < n$, то замінити j на $j+1$ і повторити крок 1.

Якщо $j = n$, то покласти $\bar{y}_{k+1} = \bar{y}_{n+1}$.

Якщо $\|\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k\| < \varepsilon$, то зупин; в іншому випадку – перейти до кроку 2.

Крок 2. Покласти $\bar{d} = \bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k$ і знайти λ_{opt} оптимальний розв’язок за-
дачі $\min_{\lambda \in E_1} f(\bar{x}_{k+1} + \lambda \bar{d})$.

Покласти $\bar{y}_1 = \bar{x}_{k+1} + \hat{\lambda} \bar{d}$, замінити на та йти до кроку 1.

2.6. Метод Розенброка

Як і метод Хука-Дживса, метод Розенброка має дискретні і безперервні варіанти. У цій лабораторній роботі студенти повинні вивчити варіант з дискретними кроками, довжина яких змінюється в залежності від значень функції в точці обчислень.

Алгоритм методу Розенброка складається з таких етапів.

Початковий етап

Вибрати число $\varepsilon > 0$, щоб зупинити алгоритм, коефіцієнт розтягнення $\lambda > 1$ і стиснення $\beta \in (-1; 0)$. В якості напрямку взяти координатні напрямки і вибрати $\overline{\Delta_1}, \dots, \overline{\Delta_n} > 0$ – початкову довжину кроку вздовж кожного напрямку. Вибрати початкову точку x^1 , покласти $y^1 = x^1$, $k = j = 1$, $\Delta_j = \overline{\Delta_j}$ для всіх j й перейти до основного етапу.

Основний етап

Крок 1. Обчислимо $z^j = y^j + \Delta d^j$ та $f(z^j)$. Якщо $f(z^j) < f(y^j)$, то крок вважається успішним. Покласти $y^{j+1} = z^j$, замінити Δ_j на $\lambda \Delta_j$ й перейти до кроку 2.

Якщо $f(z^j) \geq f(y^j)$, то крок вважається невдалим. Покласти $y^{j+1} = y^j$, замінити Δ_j на $\beta \Delta_j$ і перейти до кроку 2.

Крок 2. Якщо $j < n$, то замінити j на $j+1$ і перейти до кроку 1. В іншому випадку, тобто при $j = n$, перейти до кроку 3.

Крок 3. Якщо $f(y^{n+1}) < f(y^1)$, тобто якщо хоча б один спуск у напрямку на 1-му кроці виявився успішним, покласти $y^1 = y^{n+1}$, $j = 1$ і повторити крок 1.

Нехай $f(y^{n+1}) = f(y^1)$, тобто кожен з n останніх кроків за напрямком був невдалим. В цьому випадку порівняти $f(y^{n+1})$ й $f(x^k)$. Якщо $f(y^{n+1}) < f(x^k)$, тобто принаймні один вдалий спуск відбувся протягом k -ї ітерації на першому кроці. Якщо $f(y^{n+1}) = f(x^k)$, тобто не було жодного вда-

лого кроку за напрямком, то необхідно порівняти кроки за напрямками з параметром зупинки алгоритму. Якщо $|\Delta_j| < \varepsilon$ для всіх j , то необхідно зупинитися. При цьому x^k є наближеним оптимальним рішенням. В іншому випадку покласти $y^1 = y^{n+1}, j=1$ перейти до кроку 1.

Крок 4. Покласти $x^{k+1} = y^{n+1}$. Порівняти x^{k+1} та x^k . Якщо $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon$, то зупинитися; x^{k+1} – наближене оптимальне рішення. В іншому випадку ро-

зрахувати $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ з співвідношення
$$x^{k+1} - x^k = \sum_{j=1}^n \lambda_j d^j$$
, побудувати нові напрямки у відповідності до формул:

$$a^j = \begin{cases} d^j, & \lambda_j = 0 \\ \sum_{i=j}^n \lambda_i d^i, & \lambda_j \neq 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

$$b^j = \begin{cases} a^j, & j=1 \\ a^j - \sum_{i=1}^{j-1} \left((a^j)^T \bar{d}^i \right) \bar{d}^i, & j \geq 2, \end{cases} \quad (2.2)$$

$$\bar{a}^j = \frac{b^j}{\|b^j\|}. \quad (2.3)$$

Позначити \bar{a}^j як d^j , для всіх j замінити y^1 на x^{k+1} , k на $k+1$, покласти лічильник внутрішнього циклу $j=1$ й перейти до кроку 1.

Алгоритм методу Розенброка з мінімізацією за напрямками

Початковий етап

Нехай $\varepsilon > 0$, який використовується в критерії зупину. Вибрати як $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_n$ координатні напрями, початкову точку \bar{x}_1 , покласти $\bar{y}_1 = \bar{x}_1$, $k = j = 1$ і перейти до основного етапу.

Основний етап

Крок 1. Знайти λ_j – оптимальний розв’язок задачі мінімізації $f(\bar{y}_j + \lambda \bar{d}_j)$ за умови $\lambda \in E_1$ і покласти $\bar{y}_{j+1} = \bar{y}_j + \lambda_j \bar{d}_j$.

Якщо $j < n$, то замінити j на $j+1$ і повернутися до кроку 1. В іншому випадку перейти до кроку 2.

Крок 2. Покласти $\bar{x}_{k+1} = \bar{y}_{n+1}$.

Якщо $\|\bar{x}_{k+1} - \bar{x}_k\| < \varepsilon$, то зупин; в іншому випадку покласти $\bar{y}_1 = \bar{x}_{k+1}$, замінити k на $k+1$, покласти $j=1$ та йти до кроку 3.

Крок 3. Побудувати нову множину лінійно незалежних та ортогональних напрямків 2.1–2.3 та йти до кроку 1.

2.7. Метод деформованого багатогранника

Даний метод полягає в тому, що для мінімізації функції n змінних $f(x)$ в n -вимірному просторі будується многогранник, що містить $n+1$ вершину. Очевидно, що кожна вершина відповідає деякому вектору x . У кожній з цих вершин багатогранника оцінюється значення цільової функції. При цьому визначається вершина, якій відповідає найбільше значення цільової функції. Знайдена вершина проектується через центр ваги інших вершин багатогранника в нову точку, яка використовується в якості вершини нового багатогранника. В процесі виконання даних операцій багатогранник змінює свої розміри, що і визначило назву методу.

Нехай $x_1^0 = (x_{11}^0, \dots, x_{1n}^0)$ – початкове наближення до точки мінімуму. Як початковий багатогранник зазвичай вибирається регулярний симплекс з вершинами:

$$x_2^0 = (x_{11}^0 + r, x_{12}^0 + s, \dots, x_{1n}^0 + s),$$

$$x_3^0 = (x_{11}^0 + s, x_{12}^0 + r, \dots, x_{1n}^0 + s),$$

...

$$x_{n+1}^0 = (x_{11}^0 + s, x_{12}^0 + s, \dots, x_{1n}^0 + r),$$

$$r = \frac{t}{n\sqrt{2}}(\sqrt{n+1} + n - 1),$$

$$s = \frac{t}{n\sqrt{2}}(\sqrt{n+1} - 1).$$

де t – величина, що визначає розмір симплекса, вибирається в залежності від масштабу незалежних змінних;

n – розмірність задачі.

Крім того, необхідно задати три параметри:

- 1) коефіцієнт відображення;
- 2) коефіцієнт розтягування $\beta > 1$;
- 3) коефіцієнт стиснення $\gamma \in (0,1)$.

Алгоритм методу деформованого багатогранника полягає в наступному.

Нехай на k -й ітерації задані вершини поточного симплексу, вони пронумеровані так, що $f(x_1^k) \leq f(x_2^k) \leq \dots \leq f(x_{n+1}^k)$.

Крок 1. Визначимо координати центра ваги всіх вершин за винятком вершини x_{n+1}^k значення в якій функція має найбільше значення:

$$c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^k.$$

Крок 2. Виконується операція відображення, результатом якої є точка

$$u = c + \alpha(c - x_{n+1}^k).$$

Обчислимо значення цільової функції f в цій точці.

Крок 3. Порівняти значення $f(u^k)$ зі значеннями функції в вершинах багатогранника. При цьому можливі три випадки:

- 1) $f(x_1^k) \leq f(u) \leq f(x_n^k)$;
- 2) $f(u) < f(x_1^k)$;
- 3) $f(x_n^k) < f(u)$.

В першому випадку вершина x_{n+1}^k замінюється на u^k , чим визначається набір вершин симплекса на до $k+1$ ітерації. Перейти до кроку 6.

У другому випадку результатом відображення є нова точка u^k з найменшим значенням цільової функції. Тому напрямок відображення є перспективним. Перейти до кроку 4.

У третьому випадку результатом відображення є нова точка, яка, якщо нею замінити найгіршу вершину x_{n+1}^k , сама стане найгіршою вершиною. Перейти до кроку 5.

Крок 4. Провести розтягнення багатогранника в напрямку перспективної точки u^k згідно з формулою

$$v^k = c^k + B(u^k - c^k).$$

Обчислимо значення функції f в точці v^k . Якщо $f(v) < f(u)$, то вершина x_{n+1}^k замінюється на v , в іншому випадку – на u . Перейти до кроку 6.

Крок 5. На цьому кроці проводиться стиснення симплексу. Для цього обчислюється точка w^k за формулою

$$w = \begin{cases} c + \gamma(x_{n+1}^k - c), & f(x_{n+1}^k) \leq f(u) \\ c + \gamma(u - c), & f(x_{n+1}^k) > f(u), \end{cases}$$

і значення функції f в точці w^k .

Якщо $f(w) < \min\{f(x_{n+1}^k), f(u)\}$ то вершина x_{n+1}^k замінюється на w^k , і необхідно перейти до кроку 6. В іншому випадку вершина x_{n+1}^k замінюється на $\hat{x}_i^k = x_i^k + \frac{1}{2}(x_1^k - x_i^k)$, $i = \overline{2, n+1}$.

Отримані n точок разом з точкою x_1^k складають набір вершин симплекса на $k+1$ ітерації. Перейти до кроку 6.

Крок 6. Після завершення k ітерації проводиться перевірка нерівності:

$$\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=2}^{n+1} (f(x_i^{k+1}) - f(x_1^{k+1}))^2} \leq \varepsilon,$$

де ε – мале позитивне число, задане заздалегідь.

Якщо ця нерівність виконується, то на цьому пошук мінімуму функції завершується. В якості точки мінімуму приймається точка x_1^{k+1} . Якщо критерій зупину не виконується, необхідно перейти до кроку 1, попередньо розташувавши точки в порядку зростання функції в них.

Описаний алгоритм можна доповнити процедурою оновлення, яка полягає в заміні після певного числа ітерацій поточного многогранника новим правильним симплексом.

2.8. Завдання на лабораторну роботу

Вихідною інформацією для виконання лабораторної роботи є:

– два методи;

- функція, що оптимізується;
- точність, з якою повинна бути отримана оптимальна точка;
- точність, з якою повинне бути обчислено значення функції в оптимальній точці;
- початкові умови, з яких починається оптимізація;
- параметри.

Варіанти завдань подані в таблиці 2.1.

2.9. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи

Під час виконання лабораторної роботи необхідно дотримуватись такої послідовності кроків:

- 1) вивчити методи безумовної оптимізації нульового порядку;
- 2) побудувати діаграми діяльності алгоритмів запропонованих методів;
- 3) розробити програмне забезпечення для реалізації методів;
- 4) мінімізувати одну із функцій, наведених у таблиці 2.1 двома методами, заздалегідь визначеними викладачем;
- 5) провести порівняльний аналіз методів за точністю досягнення мінімуму, затратами машинного часу, необхідного для рішення задачі, за кількістю необхідних обчислень значення цільової функції.

Таблиця 2.1 – Варіанти завдань до лабораторної роботи

№	Вид функції	Початкові умови	Характер екстремуму
1	2	3	4
1	$f(x) = x_1^4 + x_2^4 + (x_1 + x_2)^2$	0; 0	min
2	$f(x) = x_1^3 + x_2^3 + 3x_1x_2$	-1; 3	min
3	$f(x) = -x_1 - 2x_3 - x_2x_3 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$	0; 0; 0	min
4	$f(x) = 10(x_1 - \sin x_2)^2 + 0,1x_2^2$	1; 2; 3	min
5	$f(x) = 100(x_2 - x_1^3)^2 + (1 - x_1)^2$	-1; 2; 1	min
6	$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$	3; 4	min
7	$f(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1x_2 + x_1 + 2x_3$	2; 2; 2	min

Продовження табл. 2.1

1	2	3	4
8	$f(x) = 3x_1^3 - x_1 + x_2^3 - 3x_2^2 - 1$	-1; 1	min
9	$f(x) = x_2^2 + x_3^2 + e^{x_1^2} + x_2^2 + x_3^2 + x_1 - x_2$	1; -1	min
10	$f(x) = x_1^2 + 3x_2^2 + \cos(x_1 + x_2)$	-1; 1	min
11	$f(x) = (1-x_1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_4)^2$	-2; 2; -3; 4	min
12	$f(x) = 2x_1x_2x_3 - 4x_1x_3 - 2x_2x_3 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 2x_1 - 4x_2 + 4x_3$	-3; -3; 3	min
13	$f(x) = e^{x_1^2} + x_2 + (x_1 - x_2)^2$	0; 0	min
14	$f(x) = e^{x_2} + (x_2 - x_1^2)^2$	0,5; 0,5	min
15	$f(x) = e^{-x_2} - \cos(x_1^2 + x_2)$	0; 0	min
16	$f(x) = e^{x_1} + x_2^2 - 2x_1$	0; 0	min
17	$f(x) = e^{x_1 - x_2} + x_1^2 + x_2^2$	1; 1	min
18	$f(x) = e^{x_2^2 - x_1} + x_1^2$	0; 0	min
19	$f(x) = e^{-x_1} - \cos(x_1^2 + x_2^2)$	0; 0	min
20	$f(x) = x_1^2 - e^{-x_2} + 3x_2$	0; 0	min
21	$f(x) = e^{-x_1 - x_2} + x_1^2 + x_2^2$	1; 1	min
22	$f(x) = e^{-x_1} + (x_1 + x_2^2)^2$	0,5; 0,5	min
23	$f(x) = e^{-x_2} + x_1^2 + x_2^2$	1; 1	min
24	$f(x) = e^{x_1} + e^{x_2^2 - x_1}$	-1; -1	min
25	$f(x) = e^{x_2} - \cos(x_1^2 - x_2)$	0; 0	min

В звіт до лабораторної роботи необхідно включити:

- 1) мету роботи;
- 2) алгоритми досліджуваних методів;
- 3) діаграми діяльності алгоритмів;
- 4) програмний код;
- 5) результати оптимізації, графіки;
- 6) висновки.

2.10. Контрольні запитання

1. Дайте загальну характеристику методів нульового порядку.
2. Які два типи пошуку здійснюються в методі Хука – Дживса?
3. У методі Хука – Дживса використовується постійний крок пошуку у напрямку або крок обчислюється за допомогою одновимірної оптимізаційної задачі?
4. Як будуються нові напрямки в методі Розенброка?
5. Як будується початковий багатогранник в методі Недлера – Міда (деформованого багатогранника)?
6. Чим обумовлено назву методу деформованого багатогранника?
7. Які три основні параметри використовуються в методі деформованого багатогранника?
8. У чому суть операцій: відображення, розтягування, стиснення?
9. При виконанні яких умов завершується пошук мінімізації функції в методі деформованого багатогранника?

Лабораторна робота 3. ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ БЕЗУМОВНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ ПЕРШОГО ПОРЯДКУ

Мета роботи – набути навички застосування методів пошуку екстремуму функцій без обмежень, перед тим, як перейти до важкої задачі пошуку екстремуму з обмеженнями. Це потрібно насамперед тому, що алгоритм мінімізації з обмеженнями часто базується на основі алгоритмів мінімізації без обмежень. Інша причина необхідності вивчення цієї групи методів полягає в тому, що задача оптимізації з обмеженнями часто розв’язується шляхом перетворення її в задачу оптимізації без обмежень.

3.1. Короткі відомості

Рішення багатьох теоретичних та практичних задач зводиться до знаходження екстремумів скалярної функції $f(x)$ n -вимірного векторного аргументу x , що записується у вигляді

$$f(x) \rightarrow \min. \quad (3.1)$$

За реальних умов на деякі функції $q_i(x), k_j(x)$, що характеризують якість об’єкту системи, можуть бути накладені обмеження у вигляді:

$$q_i(x) = 0, \quad i = \overline{1, k}, \quad (3.2)$$

або

$$k_j(x) = 0, \quad j = \overline{1, m}, \quad (3.3)$$

де k, m – число обмежень.

Задачу максимізації функції $f(x)$ також можна записати у вигляді (3.1)–(3.3), якщо замінити $f(x)$ на $\hat{f}(x) = -f(x)$.

Далі будуть розглянуті методи безумовної мінімізації функції $f(x)$, тобто за відсутності умов (3.2)–(3.3). Будемо вважати також, що $f(x)$ має

єдиний мінімум і що всі частинні похідні, принаймні першого порядку, існують при будь-якому значенні вектора \bar{x} .

Широке застосування для рішення задачі пошуку безумовного мінімуму функції одержали релаксаційні методи, які часто називають методами спуску. Суть їх полягає в побудові послідовності векторів $\bar{x}_0, \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n$, таких, що

$$f(x_0) > f(x_1) > \dots > f(x_n).$$

За початкову точку можна вибрати будь-яку, але необхідно використовувати всю наявну інформацію про поведінку функції $f(x)$, щоб x_0 розташовувалась не дуже далеко від точки мінімуму. Потім вибрати напрям, вздовж якого передбачається розташувати наступну точку та величину кроку вздовж цього напрямку. У релаксаційних методах точки послідовності обчислюють за формулою

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad (3.4)$$

де α_k – довжина кроку; p_k – напрям спуску.

Алгоритми безумовної мінімізації поділяють на класи залежно від максимального порядку похідних функції, що мінімізується. Методи, в яких використовуються тільки значення цільової функції, називають методами нульового порядку. Якщо крім цього потрібно обчислювати перші часткові похідні функції, то мають місце методи першого порядку, при необхідності додаткового обчислення других часткових похідних – методи другого порядку.

Дана лабораторна робота присвячена вивченню методів оптимізації першого порядку.

3.2. Градієнтні методи

Градiєнтом скалярної функції $f(x)$ в точці $x_0 = \{x_{10}, \dots, x_{n0}\}$ є вектор

$$\bar{f}'(x_0) = \left\{ \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_0), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x_0) \right\}.$$

Цей вектор перпендикулярний до площини, яка проведена через точку x_0 і дотичну до поверхні рівня, що проходить через точку x_0 . Вектор-градієнт завжди направлений в сторону зростання функції. Вектор, протилежний градієнту $\bar{f}'(x_0)$ називається антиградієнтом та направлений в сторону найбільшого спадання функції $f(x)$. У точці мінімуму градієнт функції дорівнює нулю.

Обираючи як напрям спуску p_k у виразі (3.4) антиградієнт функції $f(x)$ в точці x_k , отримаємо ітераційний процес у вигляді

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k f'(x_k), \alpha_k > 0, k = 1, 2, \dots$$

У координатній формі цей процес записується так:

$$x_{i, k+1} = x_{ik} - \alpha_k \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_k), i = \overline{1, n}$$

Методи, в яких напрям руху на кожному кроці збігається з антиградієнтом (градієнтом) функції, називають градієнтними. Вони відрізняються один від одного способами вибору кроку α_k .

У методі зі сталим кроком для всіх ітерацій вибирається деяка стала для всіх ітерацій величина кроку. Достатньо малий крок забезпечить спадання функції, тобто виконання нерівності

$$f(x_k - \alpha_k f'(x_k)) < f(x_k). \quad (3.5)$$

Однак це може привести до необхідності проводити недопустимо велику кількість ітерацій для досягнення точки мінімуму. З другого боку, надто великий крок може визвати несподіване зростання функції або привести до коливань поблизу точки мінімуму. На практиці методи зі сталим кроком застосовують рідко. Більш економічними щодо кількості ітерацій та надійнішими є градієнтні методи зі змінним кроком. Із цих методів часто застосовують метод найшвидшого спуску. В даному методі на кожній ітерації величину кроку вибирають з умови мінімуму функції $f(x)$ у напрямі руху, тобто

$$f(x_k - \alpha_k f'(x_k)) = \min f(x_k - \alpha f'(x_k)), \alpha > 0 \quad (3.6)$$

Таким чином, у цьому варіанті градієнтного спуску на кожній ітерації необхідно розв'язувати задачу одновимірної мінімізації (3.6). Алгоритм методу найшвидшого спуску складається із послідовності кроків:

Крок 1. Вибрати початкове наближення x_k та E_n та параметр закінчення пошуку мінімуму функції $f(x)$ $\varepsilon_1 > 0$ та параметр закінчення розв'язування задачі одновимірної мінімізації $\varepsilon_2 > 0$, покласти $k = 0$.

Крок 2. Обчислити $f'(x_k)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon_1$, то закінчити обчислення, тому що оптимальне рішення знайдено, інакше перейти до кроку 4.

Крок 4. Вирішити задачу одновимірної мінімізації

$$f(x_k - \alpha_k f'(x_k)) = \min f(x_k - \alpha f'(x_k)), \alpha > 0.$$

Крок 5. Покласти $x_{k+1} = x_k - \alpha_k f'(x_k)$, $k = k + 1$ і йти до кроку 2.

Крім цього, вихід із програми, яка реалізує наведений алгоритм, може здійснюватися й за такими ознаками:

- якщо мінімум вздовж напрямку спуску на ітерації не може бути визначений за допомогою підпрограми, яку використовують для рішення задачі одновимірної мінімізації (3.6);

- якщо витрачена задана кількість ітерацій.

Для порівняння студенти повинні скласти підпрограму алгоритму градієнтного методу з дробленням кроку. Алгоритм цього методу має такий вигляд:

Крок 1. Вибрати початкове наближення x_0 параметр закінчення пошуку мінімуму функції $\varepsilon_1 > 0$, коефіцієнт $\beta \in [0,5; 0,8]$ і покласти $k = 0$.

Крок 2. Обчислити $p_k = f'(x_k)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon_1$, то закінчити обчислення, інакше перейти до кроку 4.

Крок 4. Покласти $\alpha = 1$.

Крок 5. Обчислити $\Delta = f\left(x_k + \alpha(p(x_k))\right) - f(x_k) + \frac{\alpha}{2}\|f'(x_k)\|^2$.

Крок 6. Якщо $\Delta < 0$, то покласти $\alpha_k = \alpha$ та перейти до кроку 7, інакше покласти $\alpha = \alpha\beta$ і перейти до кроку 5.

Крок 7. Покласти $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p(x_k)$ $k = k + 1$ і йти до кроку 2.

Гradientні методи мають погану збіжність для функцій, матриці других похідних яких мають максимальне M та мінімальне m власні числа, що дуже відрізняються одне від одного.

Якщо $m = M$, то поверхні рівня функції сильно витягнуті. У таких випадках вздовж деяких напрямів функція змінюється значно швидше (іноді на декілька порядків), ніж у інших напрямках. Це явище називають «ефектом ярів». Напрямок антиградієнта в таких випадках суттєво відхиляється від прямого в точку мінімуму, що приводить до уповільнення швидкості збіжності. Швидкість збіжності градієнтних методів суттєво залежить від точності обчислення градієнта та величини кроку спуску. Втрата точності, а це звичайно відбувається навколо точки оптимуму або у випадку яристої функції, може взагалі порушувати збіжність процесу градієнтного спуску. Градієнтні методи часто використовують у комбінації з іншими. На початковій стадії розв'язання задачі точка x_k знаходиться далеко від точки мінімуму, і кроки в напрямі антиградієнта дозволяють досягти суттєвого спадання функції. А поблизу точки мінімуму відбувається переключення на метод, який більш ефективний на кінцевій стадії обчислювального процесу.

3.3. Методи спряжених градієнтів

Методи спряжених градієнтів відносяться до групи методів спряжених напрямів. У цих методах кроки ітераційної процедури мінімізації цільової функції здійснюються в спряжених напрямках. Два n -вимірних вектори x та y називають спряженими по відношенню до матриці H , якщо скалярний добуток

$$(x, Hy) = 0,$$

де H – симетрична додатньо означена матриця розміром $n \times n$.

Методи спряжених напрямів, на відміну від градієнтних, мають вищу швидкість збіжності. Мінімум додатково означеної квадратичної функції n -змінних

$$f(x) = a + (x, b) + \frac{1}{2}(x, Hx) \quad (3.7)$$

можна знайти не більше як за n кроків із будь-якої початкової точки, якщо ці кроки здійснювалися в спряжених напрямках. Будь-яка гладка функція поблизу точки мінімуму добре апроксимується квадратичною функцією, тому методи спряжених напрямів успішно застосовують для мінімізації й неквадратичних функцій. Тільки в такому випадку методи стають ітеративними. У цих методах найбільш важливим є проблема ефективної побудови спряжених напрямів.

У методі Флетчера – Рівза на кожному кроці відбувається перетворення антиградієнта $f'(x)$ в напрям p_k , H -спряжене з раніше знайденими напрямками p_0, \dots, p_{k-1} .

Для квадратичної функції в методі Флетчера – Рівза напрями обчислюють за формулами

$$p_k = -f'(x_k) + \beta_{k-1} p_{k-1}, k \geq 1; p_0 = -f'(x_0).$$

Величини β_{k-1} вибирають так, щоб напрями p_k, p_{k-1} були H -спряженими:

$$(p_k, H p_{k-1}) = 0.$$

У результаті для квадратичної функції маємо

$$\beta_{k-1} = \frac{(f'(x_k), f'(x_k))}{(f'(x_{k-1}), f'(x_{k-1}))}.$$

Ітераційний процес мінімізації має вигляд:

$$x_{k+1} = x_k + a_k p_k, \quad (3.8)$$

де a_k – величина кроку;

p_k – напрям спуску на x кроці;

a_k вибирають внаслідок одновимірної мінімізації:

$$f(x_k + a_k p_k) = \min f(x_k + a p_k), \quad a > 0. \quad (3.9)$$

Для квадратичної функції

$$a_k = -\frac{(f'(x_k), p_k)}{(p_k, H p_k)}. \quad (3.10)$$

Алгоритм методу спряжених градієнтів Флетчера складається з наступної послідовності кроків.

Крок 1. Вибрати початкове наближення $x_0 \in E_n$, параметр закінчення пошуку мінімуму функції $f(x)$ $\varepsilon_1 > 0$ та параметр закінчення розв'язання задачі одновимірної мінімізації $\varepsilon_2 > 0$.

Крок 2. Обчислити $p_0 = f'(x_0)$.

Крок 3. Обчислити крок a_0 за формулою (3.10).

Крок 4. Покласти $x_1 = x_0 + a_0 p_0$, $k = 1$.

Крок 5. Обчислити $f'(x_k)$.

Крок 6. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon_1$, то закінчити обчислення тому, що знайдено оптимальне рішення, інакше йти до кроку 7.

Крок 7. Обчислити напрям p_k :

$$p_k = -f'(x_k) + \frac{(f'(x_k), f'(x_k))}{(f'(x_{k-1}), f'(x_{k-1}))} p_{k-1}.$$

Крок 8. Обчислити крок a_k за формулою (3.10).

Крок 9. Покласти $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$, $k = k + 1$ та йти до кроку 5.

Ця процедура знайде мінімум квадратичної функції не більше, ніж за n кроків. При мінімізації неквадратичних функцій метод Флетчера – Рівза зі скінченного стає ітераційним. У такому випадку після $n + 1$ ітерації процедуру 1–4 циклічно повторюють із заміною x_0 на x_{k+1} , а обчислення закінчують

при $\|f'(x_k)\| \leq \varepsilon$, де ε – задане число. При цьому застосовують таку модифікацію методу:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + a_k p_k; \\ p_k &= -f'(x_k) + \beta_{k-1} p_{k-1}, \quad k \geq 1; \quad p_0 = -f'(x_0); \\ f(x_k + a_k p_k) &= \min f(x_k + a p_k), \quad a \geq 0; \\ &\begin{cases} \frac{(f'(x_k), f'(x_k) - f'(x_{k-1}))}{(f'(x_k), f'(x_k))}, & k \notin I, \\ 0, & k \in I \end{cases} \end{aligned}$$

де I – множина індексів $I = \{0, n, 2n, 3n, \dots\}$, тобто оновлення методу відбувається через кожні n кроків.

Вихід з підпрограми оптимізації здійснюють за тих самих умов, що й у методі найшвидшого спуску.

3.4. Завдання на лабораторну роботу

Вихідною інформацією для виконання лабораторної роботи є:

- два методи;
- функція, що оптимізується;
- точність, з якою повинна бути отримана оптимальна точка;
- точність, з якою повинне бути обчислено значення функції в оптимальній точці;
- початкові умови, з яких починається оптимізація;
- параметри.

Варіанти завдань наведені в таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 – Варіанти завдань до лабораторної роботи

Номер варіанта	Вид функції	Початковий вектор
1	2	3
1	$6x_1 + x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2$	$-1; -1$
2	$x_1 + x_2^2 + \left(\frac{x_1 + x_2 - 10}{3}\right)^2$	$-1; -1$
3	$5(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 5)^2$	$-1, 2; 1$
4	$(x_1 - 1)^2 + 100(x_1 - x_2)^2$	$3; 4$

Продовження табл. 3.1

1	2	3
5	$(1 - x_1)^2 + (x_1 - x_2)^2$	3; 4
6	$(x_2 - x_1)^2 + 100(1 - x_1)^2$	-1,2; 1
7	$(x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_4)^2$	2; -2,5; 2; -2,5
8	$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$	2; -2,5; 2; -2,5
9	$100 \left(x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 \right)^2 + (-x_1 + 1)^2 + (1 - x_2)^2$	-1,2; 2; 0
9	$100 \left(x_3 - \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 \right)^2 + (-x_1 + 1)^2 + (1 - x_2)^2$	-1,2; 2; 0
10	$(x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$	-3; -1; 0; 1
11	$1 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_1x_2 + x_1x_3 + x_1x_4 + x_2x_3 + x_3x_4 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_4^2$	-3; -30; -4; -0,1
12	$(x_1 - 1)^2 + 0,5(x_2 - 1)^2 + 2(x_3 - 1)^2 + 0,3(x_4 - 1)^2 + (x_1 - 1)^2 + 0,5(x_5 - 1)^2 + 0,5(x_6 - 1)^2 + (x_7 - 1)^2 + 0,7(x_8 - 1)^2 + 0,9(x_9 - 1)^2 + 6(x_{10} - 1)^2$	0;0;0;0;0;0;0;0;0;0
13	$(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2$	-1,2; 1
14	$100(x_2^2 - x_1^2) + (1 - x_1^2) + 90(x_4 - x_3^2)^2 + (1 - x_3)^3 + 10,1(x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2 + 19,8(x_2 - 1)(x_4 - 1)$	-3; -1; -3; -1
15	$20 + 0,3x_1 - 4x_2 + 0,3x_1^2 + 0,3x_2^2 + 0,4x_1x_2$	0,25; 2,5 или 2,5; 2,5
16	$x_1^2 + 5x_2^2 + 8x_3^2 - x_1x_3 + x_1x_2 - x_2x_3 + 5x_1 - 3x_2 + x_3$	1; 1 - 1
17	$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - x_1x_2 + x_1 - 2x_3$	2; 2; 2
18	$2x_1^2 + 4x_2^2 + 8x_3^2 + 2x_1x_2 - x_1x_3 + 2x_2x_3 + 6x_1 - 7x_3$	0; -1; -1
19	$7x_1^2 + 4x_2^2 + 6x_3^2 - 3x_1x_2 + x_1x_3 + x_1 - x_2 + x_3$	1; 1; -1;
20	$3x_1^2 + 5x_2^2 + 4x_3^2 + 2x_1x_2 - x_1x_3 - x_2x_3 + 7x_1 + x_3$	-1; 0; 1;
21	$x_1^2 + 5x_2^2$	-1; 3
22	$2x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_3^2 - 2x_1x_2 - 2x_2x_3 - 2x_3 - 16$	-2; 1; 1

3.5. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи

Під час виконання лабораторної роботи необхідно дотримуватись такої послідовності кроків:

- 1) вивчити методи безумовної оптимізації першого порядку;
- 2) побудувати діаграми діяльності алгоритмів запропонованих методів;
- 3) розробити програмне забезпечення для реалізації методів;

4) мінімізувати одну із функцій, наведених у таблиці 3.1 двома методами, заздалегідь визначеними викладачем;

5) провести порівняльний аналіз методів за точністю досягнення мінімуму, кількістю виконуваних ітерацій, затратами машинного часу, необхідного для рішення задачі, за кількістю необхідних обчислень значення цільової функції та її похідних.

В звіт до лабораторної роботи необхідно включити:

- 1) мету роботи;
- 2) короткі відомості про досліджувані методи;
- 3) діаграми діяльності алгоритмів;
- 4) програмний код;
- 5) результати оптимізації;
- 6) висновки.

3.6. Контрольні запитання

1. Дати характеристику методів безумовної оптимізації першого порядку.
2. Дати визначення теорем збіжності вивчених методів.
3. Перелічити способи визначення довжини кроку вздовж напрямку спуску.
4. Охарактеризувати вплив виду функції на швидкість збіжності методів.

Лабораторна робота 4. ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ БЕЗУМОВНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ ДРУГОГО ПОРЯДКУ

4.1. Короткі відомості

Методи, які використовують другі частинні похідні функції $f(x)$, є узагальненням методу Ньютона пошуку коренів системи:

$$\varphi_i(x) = 0, \quad i = \overline{1, n}. \quad (4.1)$$

Дійсно, якщо розкласти вектор-функцію $\varphi(x)$ у ряд Тейлора та утримати тільки лінійні члени, отримаємо систему

$$\varphi_i(x_k) + \sum_{s=1}^n (x^s - x_k^s) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x^s}(x_k) = 0, \quad i = \overline{1, n}.$$

Її рішення має вигляд:

$$x_{k+1} = x_k - \left(\varphi'(x_k) \right)' \varphi(x_k), \quad (4.2)$$

де $\varphi'(x_k) = \left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial x^s}(x_k) \right\}$ – квадратна матриця.

Необхідною умовою екстремуму функції багатьох змінних $f(x)$ у точці екстремуму x_* є рівність нулю її градієнта в цій точці:

$$f'(x_*) = 0. \quad (4.3)$$

Використовуючи ітераційний процес (4.2) для рішення системи рівнянь (4.3), одержимо ітераційну формулу методу Ньютона для визначення стаціонарних точок функції

$$x_{k+1} = x_k - \left(f''(x_k) \right)^{-1} f'(x_k), \quad (4.4)$$

де $\left(f''(x_k) \right)^{-1}$ – обернена матриця других похідних функції, що мінімізується.

Якщо матриця $f''(x_*)$ додатньо визначена, x_* буде точкою точного локального мінімуму функції $f(x)$. Послідовність $\{x_k\}$ збігається з точкою тільки в тому випадку, коли матриця $f''(x_k)$ додатньо визначена на кожній ітерації.

Якщо функція $f(x)$ є квадратичною, то незалежно від початку нового наближення та ступеня яристості за допомогою методу Ньютона її мінімум знаходять за один крок. Це пояснюється тим, що напрям спуску

$$p_k = (f''(x_k))^{-1} f'(x_k)$$

в будь-яких точках x_0 завжди збігається з напрямом в точку мінімуму x_* .

Якщо ж функція $f(x)$ не квадратична, але опукла, метод Ньютона гарантує її монотонне спадання від ітерації до ітерації.

Недоліком методу Ньютона є залежність збіжності для неопуклих функцій від початкового наближення x_0 . Якщо x_0 розташована досить далеко від точки мінімуму, то метод може розбігатися, а самі точки послідовності $\{x_k\}$ віддаляються від точки мінімуму. Тому необхідно змінити формулу (4.4), щоб одержати збіжність ітераційного процесу незалежно від початкового наближення. Для цього пропонується, крім напрямку спуску $(f''(x_k))^{-1} f'(x_k)$, обрати й довжину кроку вздовж нього. Відповідний алгоритм називається методом Ньютона з регулюванням кроку та має такий вигляд

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k (f''(x_k))^{-1} f'(x_k), \quad (4.5)$$

де α_k вибирають так, щоб забезпечити спадання функції, що мінімізується, на кожній ітерації.

Розглянемо два підходи до вибору кроку α_k . Перший пов'язаний з перевіркою нерівності вигляду

$$f(x_k - \alpha_k (f''(x_k))^{-1} f'(x_k)) - f(x_k) \leq \varepsilon \alpha_k (f'(x_k), p_k), \quad (4.6)$$

де $p_k = -(f''(x_k))^{-1} f'(x_k)$ – напрям спуску, а $0 < \varepsilon < 0,5$.

Якщо ця нерівність виконується при $\alpha_k = 1$, то крок приймають рівним одиниці і здійснюють наступну ітерацію, в протилежному випадку – крок дроблять до тих пір, доки нерівність не стане справедливою.

Відповідний алгоритм називають методом Ньютона – Рафсона. Другий підхід полягає у виборі кроку α_k за умови мінімуму функції $f(x)$ в напрямку спуску, тобто в результаті розв’язання задачі одновимірної мінімізації:

$$f\left(x_k - \alpha_k (f''(x_k))^{-1} f'(x_k)\right) = \min f\left(x_k - \alpha (f''(x_k))^{-1} f'(x_k)\right). \quad (4.7)$$

4.2. Алгоритм методу Ньютона

Алгоритм методу Ньютона має таку послідовність кроків.

Крок 1. Задати початкову точку $x \in E_n$, параметр закінчення пошуку $\varepsilon > 0$, покласти $k = 0$.

Крок 2. Обчислити $f'(x_k)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon$, то зупинитися, інакше – йти до кроку 4.

Крок 4. Обчислити вектор напрямку $p(x_k) = -(f''(x_k))^{-1} f'(x_k)$.

Крок 5. Покласти $x_{k+1} = x_k + p(x_k)$, $k = k + 1$ і йти до кроку 2.

Внаслідок накопичення помилок у процесі обчислювання матриця других похідних на деякій ітерації може виявитися особливою, і тоді алгоритм методу Ньютона не дасть очікуваного результату. В таких випадках необхідно застосовувати алгоритм, що полягає у такій послідовності кроків:

Крок 1. Обрати початкове наближення $x_0 \in E_n$, коефіцієнт $\beta \in [0,5; 0,8]$, параметр закінчення пошуку $\varepsilon_1 > 0$ і покласти $k = 0$.

Крок 2. Обчислити $f'(x_k)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon_1$, то закінчити обчислення, тому що знайдено оптимальне рішення, інакше йти до кроку 4.

Крок 4. Обчислити $f''(x_k)$.

Крок 5. Якщо обернена матриця $(f''(x_k))^{-1}$ існує, то обчислити

$$p(x_k) = -\left(f''(x_k)\right)^{-1} f'(x_k)$$

і йти до кроку 6; інакше покласти $p(x_k) = -f'(x_k)$ і йти до кроку 6. Обчислити величину кроку.

Крок 6. Покласти $\alpha = 1$.

Крок 7. Обчислити $\Delta = f\left(x_k + \alpha p(x_k) - f(x_k) - \frac{\alpha}{2}(f'(x_k), p(x_k))\right)^2$.

Крок 8. Якщо $\Delta \leq 0$, то покласти $\alpha_k = \alpha$ та перейти до кроку 9, інакше покласти $\alpha = \alpha\beta$ та перейти до кроку 7.

Крок 9. Покласти $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p(x_k)$, $k = k + 1$ і йти до кроку 2.

Цей алгоритм дозволяє розв'язати задачу мінімізації функції $f(x)$ – двічі безперервно диференційованої.

4.3. Метод Левенберга – Марквардта

При практичній реалізації методу Ньютона виникають труднощі, пов'язані, з одного боку, з обчисленням матриці других похідних і її оберненням, а з другого – з порушенням додатньої визначеності цієї ж матриці у процесі обчислення. Першу групу труднощів можливо перебороти, якщо замінити матрицю других похідних деяким її аналогом. Наприклад, якщо обчислити її один раз у точці x_0 та обернути, ми прийдемо до однієї з модифікацій градієнтного спуску, який дає збіжний ітераційний процес незалежно від початкового наближення. Крім того, матрицю других похідних можливо поновлювати через деяку кількість ітерацій.

При втраті матрицею других похідних додатньої визначеності послідовність $\{x_k\}$ може розбігатися. Щоб уникнути цього, Левенбергом і Марквардтом було запропоновано додавати до матриці других похідних таку матрицю, щоб підсумкова матриця була додатньо визначеною. Алгоритм методу Ньютона з вище заданою модифікацією носить назву методу Левенберга – Марквардта.

Алгоритм цього методу можна подати у вигляді такої послідовності кроків:

Крок 1. Обрати початкове наближення $x \in E_n$, параметр закінчення пошуку $\varepsilon > 0$, максимальну (допустиму) кількість ітерацій M , покласти $k = 0$ і $\lambda_0 = 10^4$.

Крок 2. Обчислити $f'(x_k)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_k)\| < \varepsilon$ або $k > M$, то здійснюється виведення результату і алгоритм припиняє свою роботу, інакше необхідно йти до наступного 4-го кроку.

Крок 4. Обчислити $p(x_k) = -(f''(x_k) + \lambda_k E)^{-1} f'(x_k)$ (E – одинична матриця).

Крок 5. Покласти $x_{k+1} = x_k + p(x_k)$.

Крок 6. Якщо $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, то йти до кроку 7, інакше – до кроку 8.

Крок 7. Покласти $\lambda_{k+1} = \frac{1}{2} \lambda_k$, $k = k + 1$, і йти до кроку 2.

Крок 8. Покласти $\lambda_{k+1} = 2\lambda_k$, і йти до кроку 4.

На початковій стадії пошуку параметру λ_0 надається велике значення (наприклад, 10^4), тому

$$-(f''(x_k) + \lambda_k E)^{-1} = [\lambda_0 E] = \frac{1}{\lambda} E.$$

Таким чином, великим значенням λ_0 відповідає напрям пошуку

$$p(x_0) \rightarrow -f'(x_0).$$

Із формули $p(x_k) = -(f''(x_k) + \lambda_k E)^{-1} f'(x_k)$ можна зробити висновок, що при зменшенні λ до нуля $p(x)$ змінюється від напрямку, протилежного градієнту, до напрямку, що визначається згідно з методом Ньютона.

Метод Левенберга – Марквардта широко використовують при рішенні задач, в яких функція, що мінімізується, записана у вигляді суми квадратів. Такі задачі виникають у регресійному аналізі.

4.4. Методи змінної метрики

Запорукою ефективності методів ньютонівського типу є облік інформації про кривизну функції, яка зберігається в матриці других похід-

них $f''(x)$. Квазіньютонівським методам притаманні позитивні властивості методу Ньютона, але дані відносно кривизни функції $f(x)$ накопичуються в них на основі нагляду за зміною градієнта $f'(x)$ під час ітерації спуску. У всіх методах вказаного класу побудова векторів напрямів спуску здійснюється за допомогою формули

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p(x_k),$$

в якій $p(x_k)$ має вигляд:

$$p(x_k) = -\xi_k^{-1} f'(x_k), \quad (4.8)$$

де ξ_k – матриця порядку $n \times n$, яка носить назву метрики.

Методи пошуку вздовж напрямів, визначених цією формулою, називають методами змінної метрики, оскільки матриця ξ змінюється на кожній ітерації. Більш точно метод змінної метрики являє собою квазіньютонівський метод, якщо відповідно до нього переміщення точки, що досліджується, задовольняє таку умову:

$$x_{k+1} - x_k = \Delta x_k = -\left(f''(x_k)\right)^{-1} (f'(x_{k+1}) - f'(x_k)). \quad (4.9)$$

У деяких групах методів матрицю $\left(f''(x_k)\right)^{-1}$ апроксимують за допомогою інформації, здобутої на k -му кроці:

$$\left(f''(x_k)\right)^{-1} \cong \omega \xi_{k+1} = \omega(\xi_k + \Delta \xi_k),$$

де $\Delta \xi_k$ являє собою матрицю, що визначається, а ω – масштабний множник.

Вибір $\Delta \xi_k$ визначає метод змінної метрики. Для забезпечення збіжності $\omega \xi_{k+1}$ повинна бути додатньо визначеною і задовольняти рівність (4.9) у тому випадку, коли вона замінює $\left(f''(x_k)\right)^{-1}$. На $k+1$ кроці відомі x_k , $f'(x_k)$, $f'(x_{k+1})$ і ξ_k , потрібно обчислити ξ_{k+1} так, щоб виконувалась рівність:

$$\xi_{k+1} \Delta g_k = \frac{1}{\omega} \Delta x_k, \quad (4.10)$$

де $\Delta g_k = f'(x_{k+1}) - f'(x_k)$, $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$.

Нехай $\Delta \xi_k = \xi_{k+1} - \Delta \xi_k$, тоді рівність (4.10) після підстановки до неї $\xi_{k+1} = \xi_k + \Delta \xi_k$ має вигляд:

$$\Delta \xi_k \Delta g_k = \frac{1}{\omega} \Delta x_k - \xi_k \Delta g_k. \quad (4.11)$$

Рівняння (4.11) треба розв'язати відносно $\Delta \xi_k$. Розв'язання має вигляд

$$\Delta \xi_k = \frac{1}{\omega} \frac{\Delta x_k y^t}{y^t \Delta g_k} - \frac{\xi_k \Delta g_k z^t}{z^t \Delta g_k},$$

що можна перевірити прямою підстановкою. Тут y і z – довільні вектори. Якщо обрати $y = z = \Delta x_k - \xi_k \Delta g_k$ та $\omega = 1$, то отримаємо алгоритм Бройлена, а якщо $y = \Delta x_k$, $z = \xi_k \Delta g_k$ – алгоритм Девідона – Флетчера – Пауелла (ДФП). У лабораторній роботі студенти повинні використовувати метод ДФП.

Алгоритм методу ДФП складається із наступної послідовності кроків.

Крок 1. Обрати початкове наближення оптимального рішення $x_0 \in E_n$ параметр закінчення основного ітераційного процесу $\varepsilon_1 > 0$, параметр закінчення одновимірної пошуку $\varepsilon_2 > 0$.

Крок 2. Обчислити $f'(x_0)$.

Крок 3. Якщо $\|f'(x_0)\| < \varepsilon_1$, то скінчити обчислення, інакше перейти до кроку 4.

Крок 4. Покласти $k = 0$, $\xi_0 = E$ (одинична матриця).

Крок 5. Покласти $p(x_k) = -\xi_k f'(x_k)$.

Крок 6. Обчислити таке число $\lambda_k > 0$, що

$$f(x_k + \lambda_k p(x_k)) = \min_{\lambda} f(x_k + \lambda p(x_k)), \quad \lambda > 0.$$

Крок 7. Обчислити $f'(x_k + \lambda_k p(x_k))$.

Крок 8. Якщо $\|f'(x_k + \lambda_k p(x_k))\| < \varepsilon_1$, то закінчити обчислення, інакше покласти

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k + \lambda_k p(x_k), \\ \Delta g_k &= f'(x_{k+1}) - f'(x_k), \\ \Delta x_k &= x_{k+1} - x_k, \\ \xi_{k+1} &= \xi_k + \frac{\Delta x_k \Delta x_k^t}{\Delta x_k^t \Delta g_k} - \frac{\xi_k \Delta g_k \xi_k^t \Delta g_k^t}{\xi_k \Delta g_k^t \Delta g_k}\end{aligned}$$

та йти до кроку 5.

Слід зазначити, що в деяких задачах неможливо досягти мінімуму функції за допомогою методів змінної метрики, якщо ступінь точності одномірного пошуку недостатня. Тому рекомендується, щоб точність одномірного пошуку була принаймні еквівалентна точності, потрібній для закінчення основного алгоритму.

4.5. Завдання на лабораторну роботу

Вихідною інформацією для виконання лабораторної роботи є:

- два методи;
- функція, що оптимізується;
- параметри, що використовуються в алгоритмах досліджуваних методів.

Варіанти завдань наведені в таблиці 4.1.

Таблиця 4.1 – Варіанти завдань до лабораторної роботи

№	Вид функції	Початковий вектор
1	2	3
1	$4x_1^2 + x_2^2 - 40x_1 - 12x_2 + 136$	4;8
2	$(x_1 - x_2)^2 + \left(\frac{x_1 + x_2 - 10}{3}\right)^2$	0;1
3	$(x_1 - 1)^2 + 10(x_2 - 1)^2 + 100(x_3 - 1)^2 + 1000(x_4 - 1)^2$	-1; -2; -3; -4
4	$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + 16x_1^2x_2^2 + 8x_2^2x_3^2 + x_3^2x_4^2 + 2$	-1; -2; -3; -4
5	$100(x_2 - x_1^3)^2 + (1 - x_1)^2$	-1;2;1

Продовження табл. 4.1

1	2	3
6	$5(x_1 - 3)^2 + (x_2 - 5)^2$	0; 0
7	$9x_1^2 + 16x_2^2 - 90x_1 + 128x_2$	0; 3
8	$2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_1x_2 - 4x_1 - 6x_2$	1; 1
9	$5x_1^2 + 4x_1x_2 + x_2^2 - 16x_1 - 12x_2$	1; 1
10	$2x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 - 11x_1 - 8x_2$	-3; -5
11	$e^{x_2} - \cos(x_1^2 - x_2)$	0; 0
12	$x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 - 2x_1 + x_2$	3; 5
13	$x_1^3 - x_1x_2 + x_2^2 - 2x_1 + 3x_2 - 4$	2; -2
14	$4x_1^2 - 4x_1x_2 + 3x_2^2 + x_1$	0; 0
15	$8x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$	10; 10
16	$2x_1^3 - 10x_1x_2 + 4x_1x_2^2 + x_2^2$	5; 2
17	$3x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 - 6x_1 - 4x_2 - 2x_3 + x_3^2$	2; 5; 5
18	$x_1^2 - 6x_1x_2 + 2x_2^2 - 3x_3^2 + 8x_1x_3 - 4x_2x_3$	1; 1; -5
19	$x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + 3x_3^2 - 2x_2x_3 - 2x_1x_3$	2; 2; 3
20	$(x_1^2 + (x_2^2 + 1)^2)(x_1^2 + (x_2 - 1)^2)$	-2; 4
21	$x_1 - x_1x_2 + 2x_2^2 + 3x_1^2 - 2x_1x_3 + x_2$	1; 3
22	$x_1^2 + 2x_1x_2 - 10x_1 - 5x_2$	5; 2
23	$-x_1^2 + 2x_1x_2 - 5x_2^2 + 10x_1 - 10x_2$	2; -2
24	$x_1^4 - 4x_1 + 2x_2^2 + 3x_3^2 - 4x_2x_3$	4; 2; 2
25	$(x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$	5; 5
26	$(x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$	3; -1; 0; 1

4.6. Порядок виконання та оформлення лабораторної роботи

Під час виконання лабораторної роботи необхідно дотримуватись такої послідовності кроків:

- 1) вивчити методи безумовної оптимізації другого порядку;
- 2) побудувати діаграми діяльності алгоритмів запропонованих методів;
- 3) розробити програмне забезпечення для реалізації методів;

4) мінімізувати одну із функцій, наведених у таблиці 4.1 двома методами, заздалегідь визначеними викладачем;

5) провести порівняльний аналіз методів за точністю досягнення мінімуму, кількістю виконаних ітерацій, затратами машинного часу, необхідного для рішення задачі, за кількістю необхідних обчислень значення цільової функції та її градієнта.

В звіт до лабораторної роботи необхідно включити:

- 1) мету роботи;
- 2) короткі відомості про досліджувані методи;
- 3) діаграми діяльності алгоритмів;
- 4) програмний код;
- 5) результати оптимізації;
- 6) висновки.

4.7. Контрольні запитання

1. Дайте загальну характеристику методів безумовної оптимізації другого порядку.

2. Охарактеризуйте підходи до вибору кроку в методах безумовної оптимізації другого порядку.

3. Для мінімізації якого класу функцій використовується алгоритм Ньютона?

4. В яких випадках при мінімізації функцій класичний метод Ньютона не дає бажаного результату? Що необхідно змінити в подібних випадках в алгоритмі?

5. Викладіть суть модифікації методу Ньютона, що запропонована Левенбергом і Марквардтом.

6. Охарактеризуйте клас функцій, для яких широко використовується метод Левенберга – Марквардта.

7. Як визначаються напрямки в методах змінної метрики?

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Таха Хемди А. Введение в исследование операций, 7-е издание : Пер. с англ. / А. Таха Хемди. – М. : Издательский дом «Вильямс», 2005. – 912 с.
2. Базара М. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы / М. Базара, К. Шетти. – М. : Мир, 1982. – 583 с.
3. Акулич И. Л. Математическое программирование в примерах и задачах / И. Л. Акулич. – Лань, 2011. – 352 с.
4. Карманов В. Г. Математическое программирование : учеб. пособие. 5-е изд., стереотип. / В. Г. Карманов. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 264 с.
5. Конюховский П. В. Математические методы исследования операций в экономике / П. В. Конюховский. – СПб : Питер, 2000. – 208 с.
6. Фиакко А. Нелинейное программирование / А. Фиакко, Г. Мак-Кормик. – М. : Мир, 1972. – 240 с.

Навчальне видання

Гужва Віктор Олексійович
Стратієнко Наталія Костянтинівна
Бородіна Інна Олександрівна

**МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ДО ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНИХ
РОБІТ З КУРСУ «ДОСЛІДЖЕННЯ ОПЕРАЦІЙ»**

для студентів, які навчаються за спеціальностями
121 «Інженерія програмного забезпечення» та 122 «Комп'ютерні науки»

Відповідальний за випуск проф. Годлевський М. Д.
Роботу до видання рекомендував проф. Горілий О. В.

В авторській редакції

План 2018 р., поз. 384

Підписано до друку _____. Формат 60x84 1/16.
Гарнітура Times New Roman. Ум. друк. арк.

Видавничий центр НТУ «ХП»
Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 5478 від 21.08.2017 р.
61001, Харків, вул. Кирпичова, 2

Самостійне електронне видання