Метод Пауэлла

С помощью метода Пауэлла определяется местонахождение минимума некоторой целевой квадратичной функции f(x), при H(f)>0, где H(f) — матрица Гессе - матрица вторых частных производных.

$$H(f)=egin{bmatrix} rac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & rac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & rac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \ rac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & rac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & rac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \ dots & dots & dots & dots \ rac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & rac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & rac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \ \end{pmatrix}_{\mathbf{X}\mathbf{1},\mathbf{X}\mathbf{2}}-$$
 переменные заданной квадратичной функции.

Путем проведения последовательных одномерных поисков (например, метод Золотого сечения), начиная с точки x_0^k (произвольное, задаем сами), вдоль системы сопряженных направлений.

 $s_0^{\hat{}}$ - направление поиска экстремума.

Направление, сопряженное к $s_0^{\hat{}}$ (например, $s_1^{\hat{}}$) находится следующим образом: $[s_1^{\hat{}}]^T*H*s_0^{\hat{}}=0$, или в общем виде:

$$[s_i^{\hat{}}]^T * H * s_j^{\hat{}} = 0; 0 <= i! = j <= n-1$$

Идея алгоритма заключается в том, что если на данном этапе поиска определяется минимум квадратичной функции вдоль каждого из сопряженных направлений и если затем в каждом направлении делается некоторый шаг, то полное перемещение от начала до конечного шага сопряжено ко всем поднаправлениям поиска.

Переход из точки $\mathbf{x}_0^{(k)}$ в точку $\mathbf{x}_m^{(k)}$ определяется формулой

$$\mathbf{x}_{m}^{(k)} = \mathbf{x}_{0}^{(k)} + \sum_{i=0}^{m-1} \lambda_{i}^{(k)} \mathbf{s}_{i}^{(k)}, \quad i = 1, \ldots, m-1.$$

 λ_i^k — длина шага, определяется по формуле (возьмем k=0):

$$\lambda^{(0)} = -\frac{\nabla^{T} f(\mathbf{x}^{(0)}) \mathbf{\hat{s}}^{(0)}}{(\mathbf{\hat{s}}^{(0)})^{T} \nabla^{2} f(\mathbf{x}^{(0)}) \mathbf{\hat{s}}^{(0)}}.$$
(*)

Рассмотрим вычислительную процедура алгоритма для квадратичной функции $f(x) = 4(x_1-5)^2 + (x_2-6)^2$:

- 1) Задается начальный вектор $X^0 = [8;9]^T$
- 2) Задается направление поиска, как правило это

$$p^1 = [1;0]^T$$

 $p^2 = [0;1]^T$

3) Вычисляется градиент grad f(x) (заданной квадратичной

функции)
$$\nabla f(X) = \begin{pmatrix} 8x_1-40 \\ 2x_2-12 \end{pmatrix}$$

4)Критерий остановки - $| \nabla f(X_0) | < \epsilon$, ϵ задана

Далее выполняется цикл до тех пор, пока не будет выполнено условие.

Итерация первая:

1) Вычисляем значение градиента в X^0 , grad $f(X^0)$, получим вектор значений. $\nabla f(X_0) = \binom{24}{6}$

2) Проверка условия сходимости

$$|\nabla f(X_0)| = \sqrt{24^2+6^2} = 24.739 > 0.1$$

- 3) Вычислим значение функции в X^0 , $f(X^0)$, Получим вектор значений. $f(X_0) = 45$.
- **4)** Сделаем шаг вдоль направления поиска $p^2 = [0;1]^T$

$$X_1 = X_0 + hp^2 = {8 \choose 9} + h {0 \choose 1} = {8 \choose h+9}$$
, где $h - длина$ шага.

$$f(X_1) = 4(8-5)^2 + ((h+9)-6)^2 \rightarrow min$$

$$f(X_1) = h^2 + 6h + 45 \rightarrow min$$

5) Найдем такой шаг h, чтобы целевая функция достигала минимума вдоль этого направления. Из необходимого условия существования экстремума функции (f'(x₁)=0):

2h+6 = 0. Получим шаг: h = -3. В коде нужно реализовать любой одномерный поиск (Опять же, метод золотого сечения), либо найти длину шага по формуле (*)

Выполнение этого шага приведет в точку:

$$X_1 = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix}$$

6) Сделаем шаг вдоль другого направления поиска $p^1 = [1;0]^T$

$$X_2 = X_1 + hp^1 = {8 \choose 6} + h {1 \choose 0} = {h+8 \choose 6}$$

$$f(X_2) = 4((h+8)-5)^2 + ((6)-6)^2 \rightarrow min$$

$$f(X_2) = 4h^2 + 24h + 36 \rightarrow min$$

Найдем такой шаг h, чтобы целевая функция достигала минимума вдоль этого направления. Из необходимого условия существования экстремума функции (f'(x₂)=0):

Выполнение этого шага приведет в точку:

$$X_2 = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}$$

7) Повторно сделаем шаг вдоль направления поиска $p^2 = [0;1]^T$

$$X_3 = X_2 + hp^2 = {5 \choose 6} + h {0 \choose 1} = {5 \choose h+6}$$

$$f(X_3) = 4(5-5)^2 + ((h+6)-6)^2 \rightarrow min$$

$$f(X_3) = h^2 \rightarrow min$$

Найдем такой шаг h, чтобы целевая функция достигала минимума вдоль этого направления. Из необходимого условия существования экстремума функции (f'(x₃)=0):

Выполнение этого шага приведет в точку: х3 = (5,6).

Так как шаг равен нулю, выбираем сопряженное направление.

8) Выбираем сопряженное направление: $p^2 = x^3 - x^1$ $p^2 = [5;6]^T - [8;6]^T = [-3;0]^T$

Итерация вторая:

$$\nabla f(X_3) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Проверим критерий остановки:

$$|\nabla f(X_3)| < \epsilon$$

 $|\nabla f(X_3)| = \sqrt{0^2 + 0^2} = 0 < 0.1$

2) Вычислим значение функции в начальной точке $f(X_3) = 0$. $X = [5;6]^T -$ минимум функции.

В общем случае, условие может выполниться далеко не на второй итерации. Если бы

$$\nabla f(X_3)$$

Не был нулевым, то вычисления происходили бы точно так же, только с уже другими сопряженными направлениями.