РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

Численные методы оптимизации можно классифицировать:

1) **По размерности решаемой задачи** – одномерные, многомерные;
2) **По способу формирования шага:**
   1. **Градиентные:**

      А) по способу вычисления градиента;

      Б) по алгоритму коррекции шага;

      В) по алгоритму вычисления последующего приближения.
   2. **Безградиентные:**

      а) с поочередным изменением переменных;

б) с одновременным изменением переменных.

3. Случайного поиска:

а) со случайной стратегией;

б) со смешанной стратегией.

3) По наличию ограничений:

1. без ограничений (безусловные);

2. С ограничениями (условные):

а) с ограничениями типа «=»;

б) с ограничениями типа «≥»;

в) со смешанными ограничениями.

По порядку используемых производных алгоритмы численных методов классифицируются: *0-,1-, 2-,..,n-* го порядка.

МЕТОДЫ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА (ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ)

К методам 0-го порядка относят методы, не использующие производные.

Одномерные методы 0-го порядка: метод деления пополам, метод дихотомии, метод перебора, метод золотого сечения, метод Фибоначчи и др.

***Многомерные прямые методы*:** метод покоординатного спуска (Гаусса-Зейделя), метод Розенброка, метод деформируемого многогранника, метод вращающихся координат, метод Хука и Дживса, метод Пауэлла и др.

Методы 1-го порядка (градиентные методы)

Многомерная безусловная градиентная оптимизация: метод наискорейшего спуска, метод сопряженных направлений (градиентов) и его модификации, др.

Численные оптимизационные методы 2-го порядка – методы с использованием производных 1-го и 2-го порядка: метод Ньютона и его модификации.

Численные методы переменной метрики: метод Бройдена, метод Флетчера, метод Пирсона и др.

Численные методы случайного поиска: случайный поиск, блуждающий поиск, метод случайных направлений.

Многомерная условная оптимизация: метод проекции градиента, методы внешних и внутренних штрафных функций.

МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Задачи однопараметрической оптимизации встречаются в инженерной практике и находят применение при реализации более сложных итеративных процедур многопараметрической оптимизации.

Постановка задачи

Минимизировать функцию ***f(x)*** на промежутке **[*a;b*]:**

$$\min_{x\in[a,b]} f(x) \qquad (1)$$

Определение 1

Промежутком локализации (интервалом неопределенности) точки минимума **x*** называют любой промежуток $[\alpha;\beta]\in[a;b]$, содержащий хотя бы одну точку ***минимума.***

Теорема. ***Любые*** **x, y** $\in$ **[a;b]*,*** **x < y*, позволяют сузить промежуток локализации минимума*** **x*** ***до*** $[\alpha;\beta]$***, согласно правилам:***

1. α **= a,** β **= y,** ***если*** **f(x) < f(y);**

2. $\alpha = x$, $\beta = b$, если $f(x) > f(y)$; (2)

3. $\alpha = x$, $\beta = y$, если $f(x) = f(y)$;

Замечание. Данное правило применимо для ***унимодальных функций***.

Определение 2

Функция $f(x)$ называется ***унимодальной,*** на промежутке **$[a;b]$** и $[\alpha;\beta]\subset[a;b]$, если она

1. строго убывает на $[a;\alpha]$,
2. постоянна на $[\alpha;\beta]$.
3. строго возрастает на $[\beta;b]$.

Если **$\alpha = \beta$,** функция ***строго унимодальная.***

Для унимодальных функций любой локальный экстремум является глобальным.

Для проверки унимодальности используют критерии:

1. если ***f(x)*** дифференцируема на **[*a;b*]** и производная функции ***f '(x)*** не убывает на **[*a; b*]**, то ***f(x) унимодальна;***
2. если ***f(x)*** дважды дифференцируема на **[*a; b*]** и производная функции $f''(x) \geq 0$ при $x \in [a; b]$, то ***f(x) унимодальна.***

Пример. Дана функция $f(x)=ax^2 + вx + c \ (a > 0)$.

АЛГОРИТМ СВЕННА

Для выбора интервала, содержащего точку минимума ***x**** функции $f(x)$ применяют эвристический алгоритм Свенна.

Исходные данные: x_0 – начальная точка, ***h*** – шаг поиска.

Если $f(x_0 - h) \leq f(x_0) \geq f(x_0 + h)$, то функция не унимодальна на интервале

$(x_0 - h;\ x_0 + h)$. Необходимо выбрать другое начальное приближение x_0.

Если $f(x_0 - h) \geq f(x_0) \leq f(x_0 + h)$, тогда $[a; b]$ – интервал поиска минимума, где $a = x_0 - h$, $b = x_0 + h$.

Если $f(x_0 - h) \leq f(x_0) \leq f(x_0 + h)$, то точка минимума располагается левее, $b = x_0$.

Если $f(x_0 - h) \geq f(x_0) \geq f(x_0 + h)$, то точка минимума располагается правее, $a = x_0$.

МЕТОД ПРОСТОГО ПЕРЕБОРА (ПАССИВНЫЙ ПОИСК)

Пусть $f(x)$ функция унимодальная на отрезке $[a; b]$. Найти точку минимума с заданной погрешностью ε .

Для функции $f(x)$ задаётся первоначальный шаг $h > 0$. Например, отрезок разбивают на n равных частей $h = (b - a)/n$. Где $(b - a)/\varepsilon \leq n$

В соответствии с правилом $x^{[k]} = x^{[0]} + kh$ ($x^{[0]} = a$; $k = 0, 1, 2, \ldots$) получают точку $x^{[k]}$ и находят $f(x^{[k]})$.

Сравнивают результаты на соседних этапах, до выполнения неравенства:

$$f(x^{[k-1]}) > f(x^{[k]}) < f(x^{[k+1]}).$$

$f(x^{[k]})$ – наименьшее значение функции с максимальной погрешностью $|b - a|/n$.

Справедливо утверждение:

$$x^{[k-1]} \leq x^* \leq x^{[k+1]}.$$

Процедуру поиска минимума можно повторить на отрезке $[x^{[k-1]}; x^{[k+1]}]$ с меньшим шагом: $h` < h$.

МЕТОД ДЕЛЕНИЯ ОТРЕЗКА ПОПОЛАМ (ДИХОТОМИИ, ПОЛОВИННОГО ДЕЛЕНИЯ)

В методе вырабатывается система вложенных промежутков локализации точки минимума $\{[a^{[k]}; b^{[k]}]\}$, где $k = 0, 1, 2, \ldots$

На ***k-ом*** шаге выбираются точки $\boldsymbol{x^{[k+1]}}$, $\boldsymbol{y^{[k+1]}}$ по возможности ближе к середине отрезка.

Общая схема поиска минимума

Пусть $f(x)$ функция унимодальная на отрезке $[a_0, b_0]$.

Найти минимум функции на отрезке с заданной точностью ε.

Точки x_1, x_2 выбираются на расстоянии $\delta < \varepsilon/2$ $(\delta < \varepsilon)$ от середины отрезка:

$$x_1 = (a_i + b_i)/2 - \delta,$$

$$x_2 = (a_i + b_i)/2 + \delta.$$

За одну итерацию интервал уменьшается примерно в два раза (Рис. 1).

Вычисляют значения функции в точках x_1, x_2.

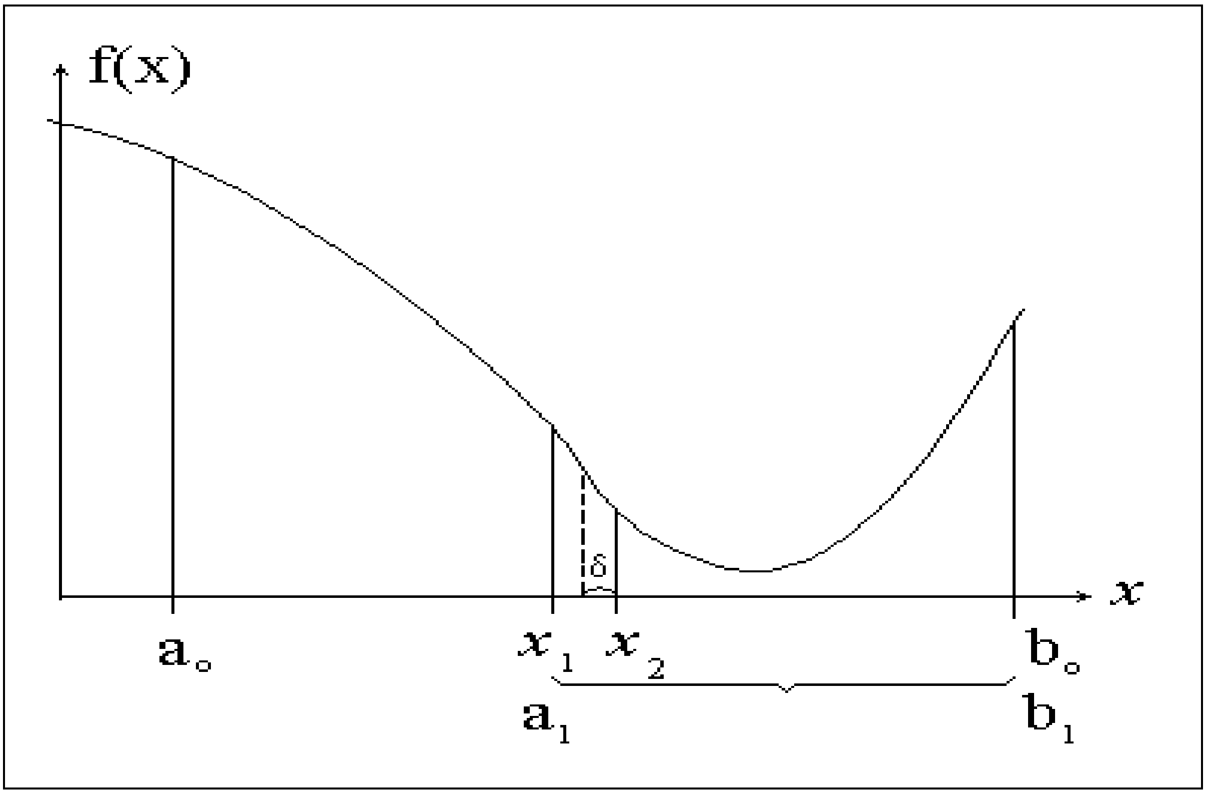

Рис. 1. Метод дихотомии

Сравнивают значения функции и переходят на новый интервал локализации:

1) если $\boldsymbol{f(x_1) < f(x_2)}$, то $\boldsymbol{b_1 = x_2}$
2) если $\boldsymbol{f(x_1) > f(x_2)}$, то $\boldsymbol{a_1 = x_1}$
3) если $\boldsymbol{f(x_1) = f(x_2)}$, то $\boldsymbol{a_1 = x_1,\ b_1 = x_2}$

Вычисления прекращаются, когда

$\left| b^{[k]} - a^{[k]} \right| \le \varepsilon$ или (и)

$\left| f(b^{[k]}) - f(a^{[k]}) \right| \le \varepsilon,$

где ε – заданная точность.

$x^* = (b^{[k]} + a^{[k]})/2$

Замечание. В литературе по указанным методам, в частности методу деления отрезка пополам, есть рекомендации выбирать три пробные точки:

середина исходного отрезка **[*a*; *b*]**

$x_c = (b + a)/2$ и две точки середины полученных двух отрезков

$x_1 = a + (b - a)/4,\ .\ x_2 = в - (b - a)/4.$

После вычисления функции в трех точках $f(x_1), f(x_2), f(x_c)$ сравнивают результат:

1) если $f(x_1) < f(x_c)$, то $b = x_c$
2) если $f(x_2) < f(x_c)$, то $a = x_c$
3) если $f(x_1) = f(x_2)$, то $a = x_1, b = x_2$

МЕТОД ЗОЛОТОГО СЕЧЕНИЯ

Интервал поиска минимума функции **[*a*; *b*]** делится на две части точкой x_1 так, что отношение длины всего отрезка к большей части ($\boldsymbol{b} - \boldsymbol{x_1}$) равно отношению большей части к длине отрезка ($\boldsymbol{x_1} - \boldsymbol{a}$):

$$\frac{b-a}{b-x_1} = \frac{b-x_1}{x_1-a} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618 = \lambda$$

Поиск основан на сравнении значений функции в двух пробных точках. Вторая точка $\boldsymbol{x_2}$ симметрична точке $\boldsymbol{x_1}$ относительно середины отрезка $[\boldsymbol{a}; \boldsymbol{b}]$ и является вторым золотым сечением этого отрезка.

Точки x_1, x_2 находятся по формулам:

$$x_1 = a + \frac{(3-\sqrt{5})}{2}(b-a) \approx a + 0.382(b-a),$$

$$x_2 = a + \frac{(\sqrt{5}-2)}{2}(b-a) \approx a + 0.618(b-a) =$$

$$= b - 0.382(b-a).$$

За одну итерацию интервал неопределенности уменьшается в $\frac{\sqrt{5}+1}{2}=1.618...$ раз.

На каждой следующей итерации функцию вычисляют один раз.

Критерий окончания можно использовать такой же, как в методе дихотомии.

МЕТОД ФИБОНАЧЧИ

Фибоначчи – итальянский математик XIII века.

Алгоритм метода Фибоначчи определяется по тем же правилам, что и метод золотого сечения. На первой итерации выбирают две точки симметрично середины отрезка **[*a*; *b*].** На каждой последующей итерации точка очередного приближения выбирается симметрично оставшейся точке.

Если $\boldsymbol{n}$ – заданное число вычислений,

$\boldsymbol{\varepsilon}$ – погрешность вычислений.

Тогда точки деления интервала $x_1^{(j)}$, $x_2^{(j)}$ ($j = 1, 2, \ldots, n$ – 1) вычисляются по формулам:

$$x_1^{(j)} = a_{(j-1)} + \frac{F_{n-j-1}}{F_{n-j+1}}(b_{(j-1)} - a_{(j-1)}) -$$

$$-\frac{(-1)^{n-j+1}}{F_{n-j+1}}\varepsilon,$$

$$x_2^{(j)} = a_{(j-1)} + \frac{F_{n-j}}{F_{n-j+1}}(b_{(j-1)} - a_{(j-1)}) +$$

$$+\frac{(-1)^{n-j+1}}{F_{n-j+1}}\varepsilon,$$

где F_k – числа Фибоначчи.

$F_0 = F_1 = 1,$

$F_k = F_{k-1} + F_{k-2}, k = 2, 3, \ldots$

Минимум функции – одна из точек $x_1^{(n-1)}$, $x_2^{(n-1)}$, которая осталась внутри интервала $[a_n, b_n]$.

Значение F_{n+1} выбирают из условия:

$$\varepsilon \le (b - a)/F_{n+1}$$

Замечание. Логическая структура поиска основана на сравнении значений функции в двух пробных точках. Следовательно, рассмотренные методы можно использовать для анализа как непрерывных, так и разрывных и дискретных функций.

Сведения о числах последовательности Фибоначчи и «золотом числе»

$\varphi = 1.61803398887\ldots$

φ – от имени Фидий, древнегреческий архитектор.

Чтобы найти значение числа $\boldsymbol{\varphi}$ необходимо отрезок длиной $\boldsymbol{x}$ поделить на две части с длинами $\boldsymbol{1}$ и $\boldsymbol{x - 1}$.

По правилу золотого сечения:

$$\frac{x}{1} = \frac{1}{x-1} \Rightarrow x(x-1) = 1;$$

$$x^2 - x - 1 = 0.$$

Решение уравнения дает корень

$$\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

После преобразований:

$\mathbf{1}/\varphi = \varphi - 1.$

$$\varphi^2 = \varphi + 1,$$

$$\varphi^3 = \varphi^2 + \varphi,$$

$$\varphi^4 = \varphi^3 + \varphi^2,$$

$$\varphi^5 = \varphi^4 + \varphi^3,$$

…

Любая степень числа φ равна сумме двух предыдущих степеней.

Кроме того:

$$\varphi^3 = \varphi^2 + \varphi = \varphi + 1 + \varphi = 2\varphi + 1,$$

$$\varphi^4 = \varphi^3 + \varphi^2 = 2\varphi + 1 + \varphi + 1 = 3\varphi + 2,$$

$$\varphi^5 = \varphi^4 + \varphi^3 = 3\varphi + 2 + 2\varphi + 1 = 5\varphi + 3,$$

…

Пример

Рассматривается «золотой» прямоугольник с длинами сторон в пропорции 1: 1.618…

В прямоугольнике строится квадрат с длиной сторон, равных длине меньшей стороны. В оставшейся прямоугольной части снова строится квадрат и т.д.

Затем в наименьший и каждый последующий квадрат вписывается дуга окружности с радиусом, равным длине стороны квадрата. Получается спираль – логарифмическая кривая.

В природе аналогично располагаются – раковины улиток, лепестки роз, галактики…

Пропорция ***1: 1.618…*** называется «божественной пропорцией».

Примеры «золотых пропорций»: строение человека, черты лица, размер картин, размер банковских карт…

Числа последовательности Фибоначчи

Выписать первые 13 чисел Фибоначчи:

$\boldsymbol{F_0} = \boldsymbol{F_1} = 1$,

$$\boldsymbol{F_k = F_{k-1} + F_{k-2},\ k = 2,\ 3, \ldots}$$

Найти частное от деления каждого числа на предыдущее. К чему стремится последовательность отношений?

Первые 13 чисел Фибоначчи:
1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233…

Частное от деления чисел:
1/1 =1,
2/1 = 2,
3/2 = 1.5,
5/3 = 1.666…,
8/5 = 1.6,
13/8 = 1.625,
21/13 = 1.615348…,
34/21 = 1.61904…,
55/34 = 1.61764…,
89/55 = 1.61818….

…

$\boldsymbol{\varphi = 1.61803398887}$

ЗАДАНИЕ ПО ТЕМЕ:

«Поиск оптимального значения однофакторной функции численными методами»

Постановка задачи

С помощью метода наименьших квадратов (МНК) найти параметры для квадратичной зависимости вида $\hat{Y} = ax^2 + вx + c$.

Необходимо:

1) Использовать алгоритм Свенна для поиска интервала локализации $[a; b]$ точки минимума функции $\hat{Y}$.
2) Проверить условия унимодальности функции $\hat{Y}$ на интервале $[a; b]$.
3) Найти минимальное значение функции $\hat{Y}$ на интервале $[a; b]$ следующими методами:

- ✓ деления отрезка пополам,
- ✓ пассивного поиска,
- ✓ золотого сечения,

- ✓ Фибоначчи, используя 10-кратное вычисление целевой функции и точность $\varepsilon = 0.001$.

4) Выполнить сравнительный анализ итерационных методов.
5) Исследовать функцию на минимум аналитически и сопоставить с численным результатом.