НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
Факультет прикладної математики
Кафедра прикладної математики

Курсова робота
із дисципліни «Дослідження операцій»
на тему: «Метод Хука-Дживса»

Виконала: | Керівник:
студентка групи КМ-12 | Старший викладач кафедри
Кузенко К.Ю. | Ладогубець Т.С.

Київ — 2024

ЗМІСТ

ВСТУП

Основною задачею в дослідженні є оптимізація програми, яка реалізує метод Хука-Дживса в залежності від різних параметрів.

Тема: Метод Хука-Дживса.

Мета: дослідження та оптимізація методу Хука-Дживса для знаходження мінімуму функції багатьох змінних в задачах умовної та безумовної оптимізацій.

Об’єкт дослідження: метод Хука-Дживса для знаходження мінімуму функції багатьох змінних.

Предмет дослідження: теоретичні основи методу, його математична формалізація, умови збіжності та практичні аспекти застосування.

Результат: програма на мові Python, яка мінімізує функцію 2-х змінних, враховує оптимальні значення параметрів методу та виводить оптимальний варіант розрахунку. Під оптимальними параметрами розуміються ті параметри, при яких виконується мінімальна кількість звернень до функції та мінімальна кількість ітерацій, при цьому кінцеве значення максимально наближається до істини.

ОСНОВНА ЧАСТИНА

1. Постановка задачі

Дослідити збіжність метода Хука-Дживса при мінімізації кореневої функції

$$f(x) = (10(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2)^{1/4}, \qquad x^{(0)} = (-1{,}2; 0{,}0)$$

в залежності від:

1. Значення початкового кроку $\|\Delta x\|$.
2. Параметрів методу.
3. Вигляду критерію закінчення. ($\begin{cases} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \le \varepsilon \\ \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \le \varepsilon \end{cases}$ або $\|\Delta x\| \le \varepsilon$).
4. Модифікацій методу.

Використати метод Хука-Дживса в якості метода спуску для умовної оптимізації в залежності від:

1. Розташування локального мінімума (всередині / поза допустимою областю).
2. Виду допустимої області (випукла / невипукла / з лінійними обмеженнями).
3. Виду метода одновимірного пошуку (ДСК-Пауелла або Золотого перетину).
4. Точності метода одновимірного пошуку.
5. Значення параметру в алгоритмі Свена.

2. Теоретична частина

У методі Хука-Дживса проводиться дослідження області знаходження початкової точки для визначення напрямку зменшення функції. Після того, як знайдено оптимальний напрямок, у цьому напрямку проводиться рух з рівномірно збільшуваним кроком – встановлюється конфігурація або тренд пошуку. Це продовжується до тих пір, поки пошук у цьому напрямку зменшує значення цільової функції. Якщо у цьому напрямку не вдається знайти точку з меншим значенням функції $f(\bar{x})$, розмір кроку зменшується. Якщо і при цьому не здійснюється зменшення значення цільової функції, то застосовується нове дослідження околу точки.

Алгоритм прямого пошуку Хука–Дживса включає в себе два основних етапи:

– досліджуючий пошук (циклічна зміна змінних), який орієнтований на виявлення характеру локальної поведінки цільової функції та визначення напрямку уздовж «ярів»;

– пошук по зразку, який використовує інформацію, одержану після проведення досліджуючого пошуку для руху по «ярам».

Досліджуючий пошук організується наступним чином. Задаються значення початкової точки $x^{(0)}$ та розмір кроку Δx, що визначає значення зміщень по кожному з координатних напрямків і може змінюватись у процесі пошуку. Обчислюється значення цільової функції $f(\bar{x})$ у базисній точці (у цьому випадку – у даній початковій точці). Потім у циклічному порядку змінюється кожна змінна (кожного разу тільки одна) на вибрані значення зміщень, обчислюється значення цільової функції $f(\bar{x})$. Якщо її значення не перевершує значення функції в попередній точці, крок пошуку розглядається як успішний. В протилежному випадку необхідно повернутися в попередню точку, зробити крок в протилежному напрямку і перевірити значення функції в наступній точці. Після перебору всіх координат досліджуючий пошук закінчується знаходженням поточної базисної точки. Якщо усі зміни змінних не призвели до покращення цільової функції, значення зміщень зменшуються, доки не буде знайдений вдалий напрямок, або Δx не стане менше заданої похибки.

Базисна точка і поточна базисна точка визначають деякий напрямок мінімізації, уздовж якого проводиться пошук по зразку.

Пошук по зразку полягає в реалізації єдиного кроку з поточної базисної точки уздовж прямої, що з'єднує цю точку з попередньою базисною точкою. Нова точка зразку визначається наступним чином. Обчислюється розрахункова допоміжна точка по формулі:

$$x_p^{(k+1)} = x^{(k)} + \left(x^{(k)} + x^{(k-1)}\right),$$

де

$x^{(k-1)}$ – попередня базисна точка (БТ),

$x^{(k)}$ – поточна базисна точка (ПБТ),

$x_p^{(k+1)}$ – допоміжна розрахункова точка.

У розрахунковій точці $x_p^{(k+1)}$ проводиться досліджуючий пошук. Знаходиться точка $x^{(k+1)}$ і значення цільової функції $f(x^{(k+1)})$. Без завершення цього досліджуючого пошуку неможливо встановити успіх чи невдачу пошуку по заданому зразку. Якщо значення $f(x^{(k+1)})$ не зменшується, порівняно з $f(x^{(k)})$, це означає, що пошук по зразку не дав потрібного результату і необхідно повернутися до попередньої базисної точки $x^{(k-1)}$, і в ній проводити досліджуючий пошук для визначення нового успішного напрямку. Якщо значення $f(x^{(k+1)})$ зменшується, порівняно з $f(x^{(k)})$, це означає, що пошук по зразку є вдалим. Поточна базисна точка $x^{(k)}$ стає базисною точкою, точка $x^{(k+1)}$ стає поточною базисною точкою.

Наявність пари цих точок (БТ – ПБТ) дозволяє побудувати новий напрямок мінімізації функції.

Пошук завершується, якщо зменшення значення цільової функції або розміру кроку менше заданої похибки обчислення точки оптимуму:

$$\begin{cases} \dfrac{\left\|x^{k+1} - x^k\right\|}{\left\|x^k\right\|} \le \varepsilon_1 \\ \dfrac{\left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right|}{f(x^k)} \le \varepsilon_2 \end{cases},$$

або

$$\|\Delta x\| \le \varepsilon$$

На наступних малюнках (рис.2.1 та рис.2.2) приведені типові траєкторії руху при використанні методу Хука-Дживса. для пошуку мінімуму а) квадратичної функції та б) функції Розенброка:

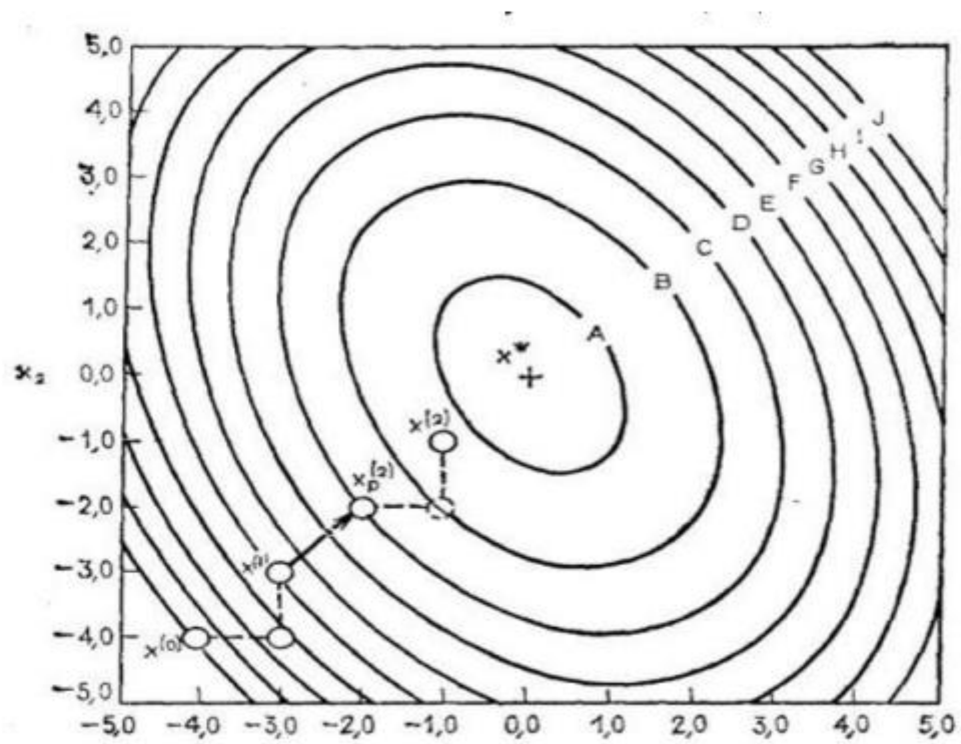


Рисунок 2.1 – Траєкторія руху методу Хука-Дживса при пошуку мінімуму квадратичної функції

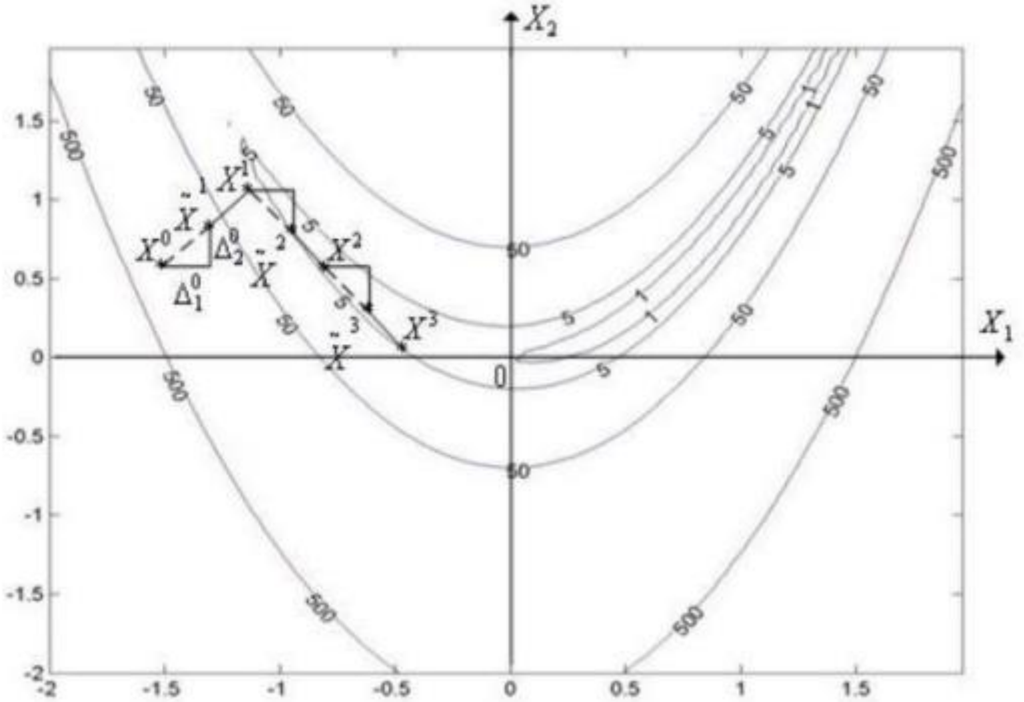


Рисунок 2.2 – Траєкторія руху методу Хука-Дживса при пошуку мінімуму функції Розенброка

Метод Хука–Дживса будується на циклічному руху по координатам пошуку характеризується нескладною стратегією пошуку, але він має наступні недоліки. Коли лінії рівня цільової функції дуже вигнуті або мають гострі кути, метод Хука–Дживса може завершити роботу, не дійшовши до оптимальної точки, або виродитися у нескінченну послідовність проведення досліджуючого пошуку (зациклювання) без переходу до прискорюючого пошуку по зразку. (рис.2.3).

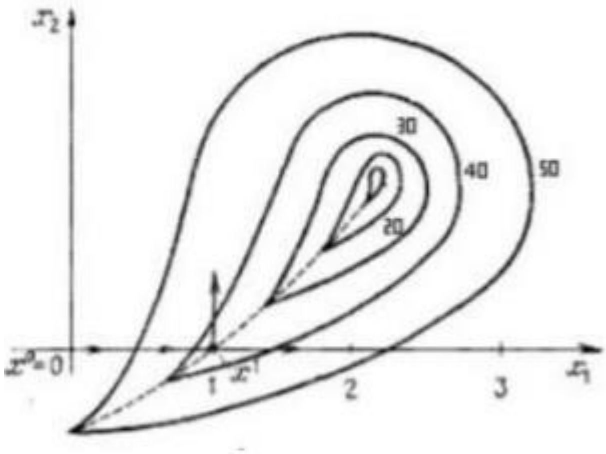


Рисунок 2.3 – Метод «застряє» в точці, відмінній від оптимуму

Для вдосконалення методу Хука–Дживса використовуються такі підходи, як введення допоміжних правил збільшення (або зменшення) розміру кроку при русі по зразку, зміна способу отримання напрямку пошуку у частині досліджуючого пошуку

3. Практична частина

Практична частина базується на реалізації програми, яка виконує мінімізацію кореневої функції за допомогою методу Хука-Дживса на мові Python.

На початку коду реалізована функція, яка буде використовуватись для підрахунку кількості викликів цільової функції протягом роботи алгоритму. На наступному етапі реалізована основна функція hooke_jeeves, яка виконує алгоритм Хука-Дживса. Вона приймає всі необхідні параметри, починаючи від самої функції, закінчуючи допустимою похибкою для критерію закінчення. Далі визначена функція explore, яка виконує локальний пошук у кожному напрямку з поточної точки:

- Для кожного виміру додається базовий крок до координати точки.
- Якщо цільова функція в новій точці має менше значення, поточна точка оновлюється.
- Якщо цільова функція не покращується, зворотний крок перевіряється.
- Функція повертає оновлену точку після перевірки всіх вимірів.

Основний цикл алгоритму виконується до досягнення критерію закінчення або перевищення максимальної кількості ітерацій:

- Спочатку виконується локальний пошук за допомогою функції explore.
- Якщо нова точка не покращує цільову функцію порівняно з поточною найкращою точкою x_best, розмір кроку зменшується.
- Якщо нова точка краща, виконується шаблонний пошук, де напрямок руху подвоюється.

3.1 Задача безумовної оптимізації

Дослідимо збіжність метода Хука-Дживса при мінімізації кореневої функції

$$f(x) = (10(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2)^{1/4}, \qquad x^{(0)} = (-1{,}2; 0{,}0)$$

в залежності від різних параметрів методу в задачі безумовної оптимізації. Визначимо оптимальні значення, при яких буде мінімальна кількість звернень до функції та найближчий результат до істини.

Визначимо вплив величини початкового кроку $\|\Delta x\|$. Початкові дані оберемо наступні:

- Критерій закінчення: $\begin{cases} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \le \varepsilon \\ \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \le \varepsilon \end{cases}$
- Величина похибки: $\varepsilon = 10^{-6}$
- Коефіцієнт зменшення: $\alpha = 2$
- Початкова точка: $x^{(0)} = (-1{,}2; 0{,}0)$

Величина кроку	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
0.1	(1.2, 1.2)	0.44721359549995765	131
0.01	(1.02, 1.02)	0.14142135623731586	315
0.001	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	999
0.0001	(1.0004, 1.0004)	0.019999999994247942	2953

При зменшенні кроку і надалі, кількість обчислень буде зростати, тому продовжувати немає сенсу. З отриманих результатів бачимо, що найменша кількість обчислень функцій при величині кроку 0.1. Але зважаючи на значення функції, цей варіант не підходить, адже надалі можливе накопичення похибки, що негативно вплине на значення функції. Для подальшого дослідження обрано значення 0.001, оскільки після нього відбувається значний скачок в кількості обчислень, але відносно невеликий – в значенні функції (порівняно з іншими).

Визначимо вплив величини похибки при мінімізації кореневої функції. Початкові дані оберемо наступні:

- Критерій закінчення: $\begin{cases} \frac{\|x^{k+1}-x^k\|}{\|x^k\|} \le \varepsilon \\ \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \le \varepsilon \end{cases}$
- Величина кроку: $\|\Delta x\| = 0.001$
- Коефіцієнт зменшення: $\alpha = 2$
- Початкова точка: $x^{(0)} = (-1{,}2; 0{,}0)$

Величина похибки	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
0.001	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	1001
0.0001	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	999
0.00001	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	999
0.000001	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	999

З отриманих результатів бачимо, що найменша кількість обчислень функції при величині 0.0001 та менших за неї. Оберемо для подальшого дослідження значення $\varepsilon = 0.0001$.

Визначимо вплив критерія закінчення. Початкові дані оберемо наступні:

- Величина похибки: $\varepsilon = 0.0001$
- Величина кроку: $\|\Delta x\| = 0.001$
- Коефіцієнт зменшення: $\alpha = 2$
- Початкова точка: $x^{(0)} = (-1{,}2; 0{,}0)$

№	Критерій закінчення	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
1	$\begin{cases} \dfrac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \leq \varepsilon \\ \left\|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right\| \leq \varepsilon \end{cases}$	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	999
2	$\|\Delta x\| \leq \varepsilon$	(1.000125, 1.000125)	0.0111803398849934 56	1118

З отриманих даних можна відмітити, що найменшу кількість обчислень функцій, серед представлених критеріїв, має критерій під номером 1. Отже, оптимальним варіантом буде даний критерій :

$$\begin{cases} \dfrac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \leq \varepsilon \\ \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leq \varepsilon \end{cases}$$

Враховуючи всі оптимальні параметри, побудуємо траєкторію пошуку при мінімізації функції методом Хука-Дживса (рис. 3.1.1). По ній можемо бачити, наскільки швидким є вирішення задачі та наскільки близьким є знайдений мінімум до істинного значення. При розв'язку виконались лише 3 ітерації.

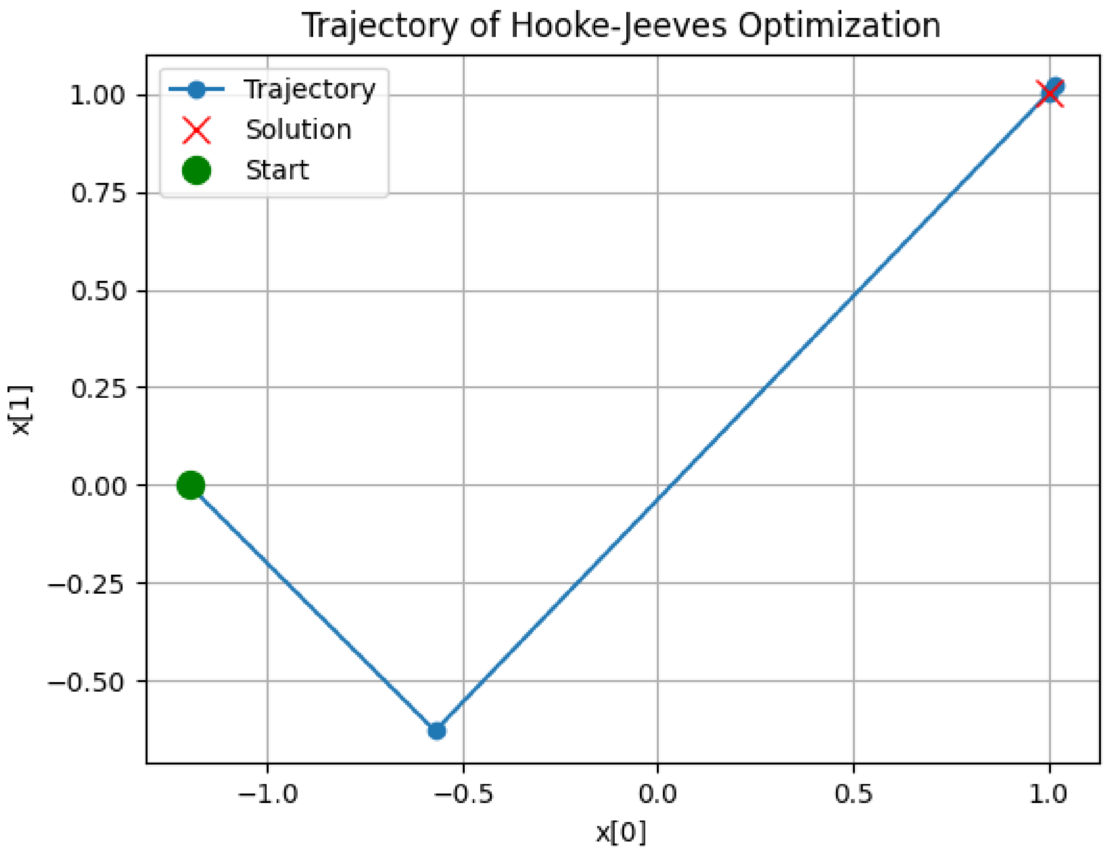


Рисунок 3.1.1 – Графічне зображення траєкторії пошуку

3.2 Задача умовної оптимізації

Використаємо метод Хука-Дживса в якості метода спуску для умовної оптимізації в залежності від розташування локального мінімума. Для цього додамо до нашого попереднього варіанту розв'язку обмеження. Розглянемо два варіанти:

$$1.\ x_1 + x_2 \geq -2$$
$$2.\ x_1 + x_2 \leq 1$$

Варіант 1 включає локальний мінімум, варіант 2 – ні. Варто зазначити, що в будь-якому випадку допустима область повинна включати в себе початкову точку.

Програма з допустимою областю, яка включає локальний мінімум, швидко досягла його, ніяких проблем не виникло. В іншому випадку ніяких позитивних результатів немає, оскільки програма зациклилась (рис 3.2.1) в кінцевій точці допустимої області, тому вводимо обмеження ітерацій для завершення програми.

№	Допустима область	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
1	$x_1 + x_2 \geq -2$	(1.001, 1.001)	0.031622776600814875	996
2	$x_1 + x_2 \leq 1$	(0.521, 0.477)	0.7062574310697681	6905

При локальному мінімумі поза допутимою областю за даних умов неможливо буде досягнути мінімуму, тому такий вид обмежень не є ефективним при використанні метода Хука-Дживса. Потрібно вводити додаткові штрафні функції або ж використовувати інший метод.

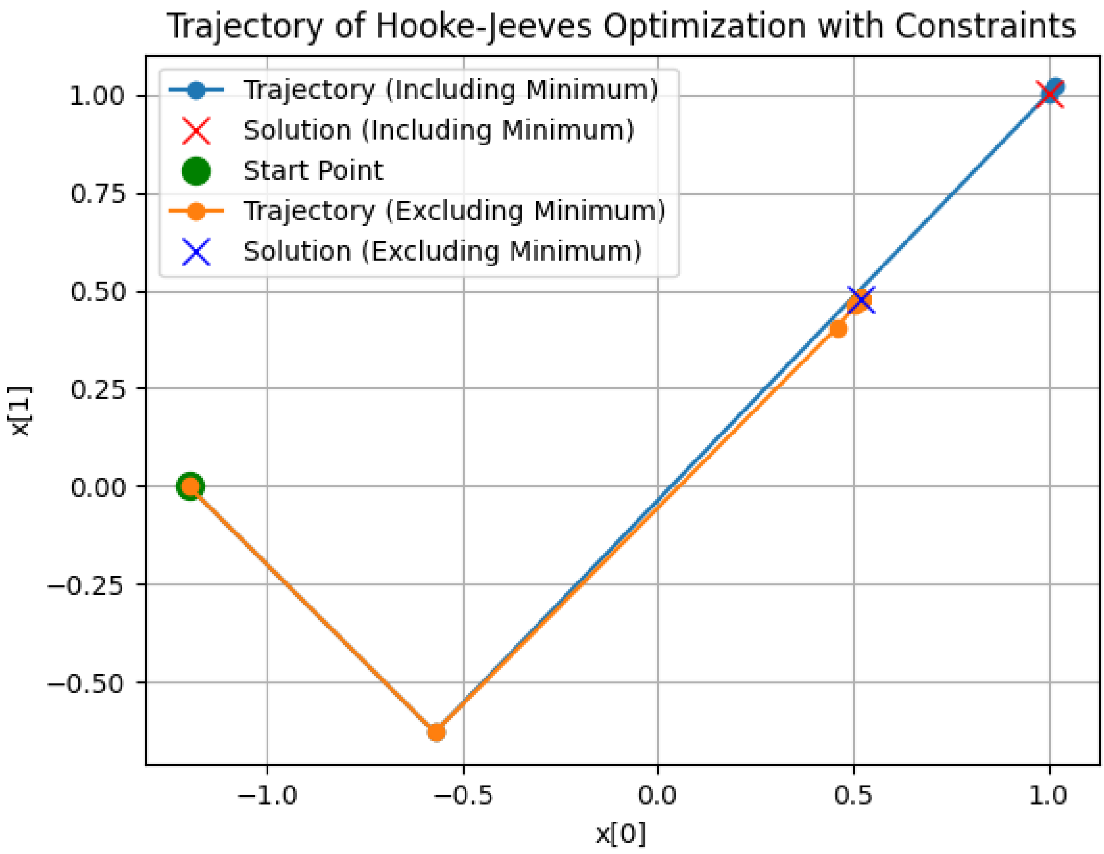


Рисунок 3.2.1 – Графічне зображення траєкторії пошуку в залежності від розташування локального мінімуму

Отже, в подальшому дослідженні будемо використовувати лише ті допустимі області, які включають в себе локальний мінімум.

Дослідимо вплив виду допустимої області. Для цього задамо три види обмеження для нашого методу:

1. Випукла допустима область:

$$(x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0.5)^2 \leq 5$$

2. Невипукла допустима область:

$$\begin{cases} (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2 \leq 2.56 \\ (x_1 + 1.2)^2 + (x_2)^2 \leq 1.44 \end{cases}$$

3. Лінійні обмеження:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 \geq -2.4 \\ x_1 - 2x_2 \leq 1.2 \end{cases}$$

При використанні випуклої області та лінійних обмежень не виникло жодних проблем, метод працює коректно. При використанні невипуклої області було задано такі обмеження, які включають весь шлях пошуку, тому проблем також не виникає (рис. 3.2.2).

Метод не буде працювати коректно у випадку, якщо задати невипуклу область, яка не включає весь шлях. Тоді відбудеться зациклення та точка мінімуму не буде знайдена. Характер пошуку буде такий самий, як і при пошуку мінімуму, який знаходиться поза допустимою областю (рис. 3.2.1).

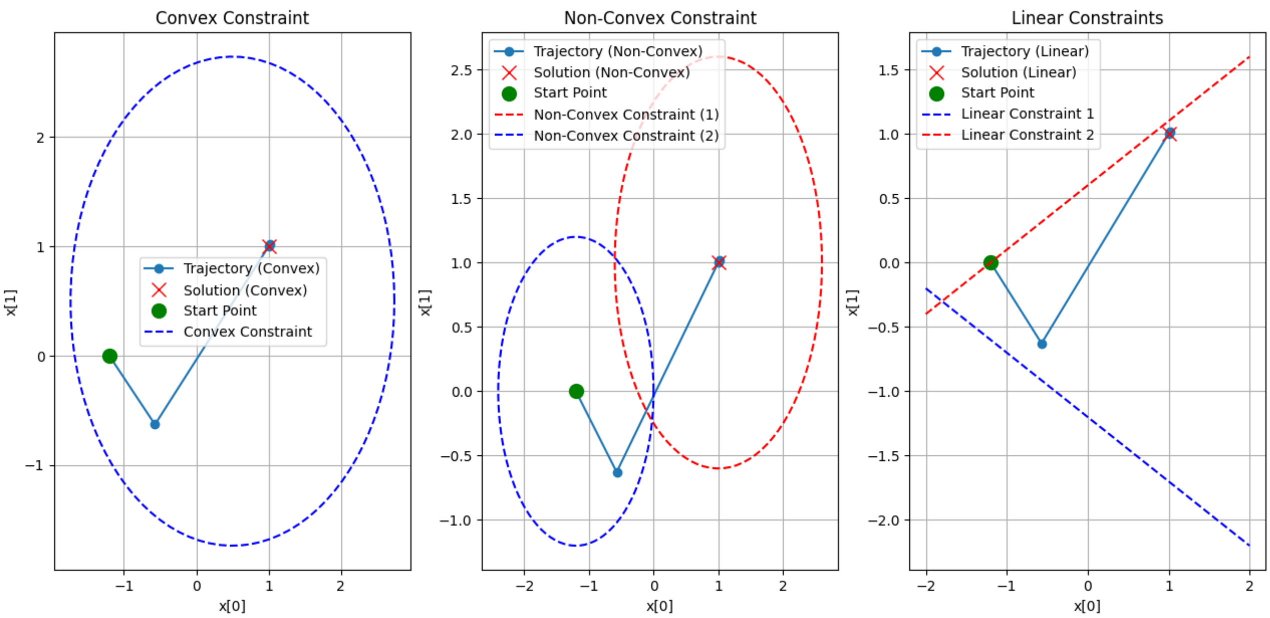


Рисунок 3.2.2 – Траєкторія пошуку в залежності від виду області

Дослідимо вплив метода одновимірного пошуку. Для цього додамо функції, які виконують алгоритм методу золотого перетину та ДСК-Пауелла.

№	Метод одновимірного пошуку	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
1	Золотого перетину	(0.99999955, 1.00000001)	0.00124234841155055	6518
2	ДСК-Пауелла	(0.99882422, 0.99874609)	0.034662026436216915	5787

Метод Золотого перетину показує більш точний результат, але в приорітеті той варіант, який має меншу кількість обчислень функції. Тому для подальших досліджень оберемо метод ДСК-Пауелла. Дослідимо вплив точності даного методу на мінімізацію функції.

Величина точності	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
0.1	(-1.2, 0)	2.094359673000858	15
0.01	(-1.2, 0)	2.094359673000858	15
0.001	(1, 1)	4.6029464941783863e-07	2047
0.0001	(1.00009375, 1.00009375)	0.009682458363317189	4488

Хоч при значенні 0.1 та 0.01 мінімальна кількість викликів функції, але при цьому велика похибка в обчисленні мінімуму. Тому ці варіанти відкидаються, при подальшому дослідженні будемо використовувати точність 0.001, яка має відносно небагато звернень до функції та яка практично співпадає з точкою мінімуму.

Дослідимо вплив значення параметру в алгоритмі Свена. Для цього додамо функцію, яка виконує алгоритм Свена, та оптимізуємо програму під неї.

Величина параметру	Точка мінімуму	Значення функції в точці мінімуму	Кількість обчислень функції
0.1	(0.99873047, 0.99863281)	0.03614625261561401	1648
0.01	(1, 1)	3.11106090237177e-08	1299
0.001	(1, 1.00025)	0.02811706625948469	1010
1	(0.99934082, 0.99951172)	0.02919583848543915	6689
2	(0.99934082, 0.99951172)	0.02919583848543915	7035
0.015	(1.00007813, 1.00007813)	0.008838834764852947	1486
0.009	(1.00035937, 1.00026562)	0.021584174987037894	1063

У випадку використання алгоритму Свена найоптимальнішим варіантом для величини параметру буде 0.01, оскільки він найближче підійшов до мінімуму та має відносно небагато звернень до функції. Звісно, є значення при яких кількість звернень до функції менша, але похибка при обчисленні мінімуму досить велика, тому ми відкидаємо такі варіанти.

ВИСНОВКИ

В результаті аналізу були знайдені значення параметрів, при яких програма найточніше наближається до точки мінімуму за мінімальну кількість викликів цільової функції – 1299.

Параметри:

Знайдена точка мінімуму	(1, 1)
Значення функції в точці мінімуму	3.11106090237177e-08
Точність	$\varepsilon = 0.0001$
Початковий крок	$\|\Delta x\| = 0.001$
Критерій закінчення	$\begin{cases} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \leq \varepsilon \\ \left\|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right\| \leq \varepsilon \end{cases}$
Розташування локального мінімуму	Всередині допустимої області
Метод одновимірного пошуку	ДСК-Пауелла
Точність метода одновимірного пошуку	0.001
Значення параметру в алгоритмі Свена	0.01

В ході виконання роботи були досліджені оптимальні параметри методу Хука-Дживса для пошуку мінімуму квадратичної функції.

Було виявлено, що критерій закінчення $\begin{cases} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k\|} \leq \varepsilon \\ \left|f(x^{k+1}) - f(x^k)\right| \leq \varepsilon \end{cases}$ є більш точним, ніж $\|\Delta x\| \leq \varepsilon$.

Також оптимальним варіантом початкового кроку для обох точок є $\|\Delta x\| = 0.001$, оскільки після нього відбувається значний скачок в кількості обчислень, але відносно невеликий – в значенні функції.

Для значення точності було обрано $\varepsilon = 0.0001$, оскільки при цьому значенні найменша кількість обчислень функції.

При дослідженні методу для задач умовної оптимізації було виявлено, що, в разі розташування мінімуму поза допустимою областю, при наданих умовах знайти мінімум неможливо. При розташуванні мінімуму в допустимій області ніяких проблем при його пошуку не виникає.

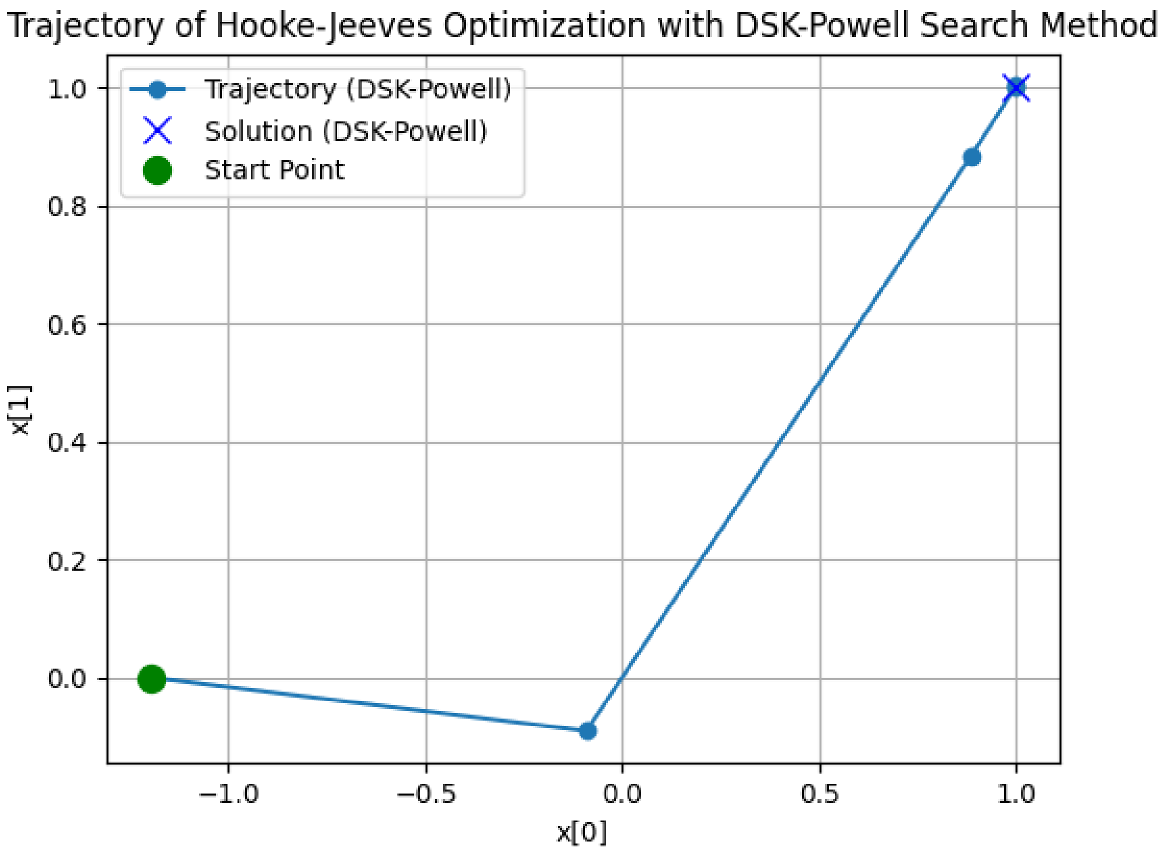
В залежності від виду допустимої області, результат може відрізнятись:

1. Випукла область: у даному випадку все працює коректно, ніяких ускладнень не виявлено.
2. Невипукла область: у випадку, якщо вся траєкторія пошуку буде належати цій області, то проблем не виникатиме, в іншому випадку – відбувається зациклення та мінімум не знаходиться. Тобто, в залежності від заданої невипуклої області – результат може бути різним, але в більшості випадків мінімум не знаходиться.
3. Лінійні обмеження: у даному випадку метод також працює ефективно, ніяких ускладнень не виявлено.

При дослідженні впливу метода одновимірного пошуку, виявлено, що метод Золотого перетину більш точний, але при цьому менш оптимізований, тобто кількість обчислень функції значно більша ніж при застосуванні методу ДСК-Пауелла. Тому метод ДСК-Пауелла було обрано оптимальним методом одновимірного пошуку. При правильно підібраній точності (0.001) даний метод показує набагато точніші результати, ніж метод Золотого перетину.

Було знайдено оптимальне значення параметру в алгоритмі Свена – 0.01, при якому програма практично знайшла мінімум та мнімізувала кількість звернень до функції.

Кінцева траєкторія пошуку при використанні вищезгаданих параметрів:



Отже, можна зробити висновок, що метод Хука-Дживса підходить для мінімізації функції багатьох змінних та виконує задачу лише за 4 ітерації.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ладогубець Т. С. Чисельні методи оптимізації: з дисципліни «Методи оптимізації» [Електронний ресурс] : практикум / Т. С. Ладогубець, О. Д. Фіногенов, А. М. Губський; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 125 с
2. Метод конфігурації Хука-Дживса [Електронний ресурс] – Цубера М. М. – https://wiki.tntu.edu.ua/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%BA%D0%BE%D0%BD%D1%84%D1%96%D0%B3%D1%83%D1%80%D0%B0%D1%86%D1%96%D1%97_%D0%A5%D1%83%D0%BA%D0%B0-%D0%94%D0%B6%D0%B8%D0%B2%D1%81%D0%B0
3. Пошук екстремума функції методом Хука-Дживса [Електронний ресурс] – http://www.100byte.ru/stdntswrks/hj/hj.html
4. Реалізація методу Хука-Дживса [Електронний ресурс] – https://github.com/sanonesan/optimization_methods_labs/blob/master/lab6_straight_optimization/lab6_straight_optimization.ipynb
5. Модифікований метод Хука-Дживса [Електронний ресурс] – https://studfile.net/preview/9424062/page:2/

ДОДАТКИ

Додаток А

Оскільки є досить багато варіацій коду в залежності від значень різних параметрів, код займає багато місця. Для зручності використання та для легкості перегляду, він доданий на репозиторій GitHub, який знаходиться за посиланням: https://github.com/Katya-Kuzenko/coursework