Министерство образования и науки Российской Федерации.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»**

Факультет Автоматики и вычислительной техники
Кафедра Вычислительной техники

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
Численные методы оптимизации

Методические указания к лабораторной работе
для студентов II курса дневного отделения АВТФ
Образовательные программы:
09.03.01 «Информатика и ВТ»;
09.03.04 «Программная инженерия»;
12.03.01 «Приборостроение»

НОВОСИБИРСК 2017

Содержание

1 Описание лабораторной работы

Цель: Научится применять численные методы поиска экстремумов функций действительного аргумента заданных аналитическим выражением или таблично; исследовать основные свойства оптимизационных процедур, выбирать способы и параметры алгоритмов для достижения результатов требуемого качества.

1.1 Порядок выполнения работы

1) На основе предложенных примерах познакомиться и приобрести навыки численного решения основных задач поиска экстремумов функций действительного аргумента заданных аналитическим выражением или таблично. Для этого необходимо: выполнить различные вычислительные эксперименты на предложенных образцах функций и реализованных в примерах числовых процедур решения задач оптимизации; дать необходимые комментарии, пояснения и сделать выводы о их свойствах. В предлагаемых примерах рассматриваются задачи безусловной и условной нелинейной оптимизации как скалярных, так и функций нескольких аргументов.

2) В соответствии с контрольным заданием реализовать программы-функции в среде MathCAD и применить их для решения контрольной задачи.

3) По результатам проделанной работе подготовить отчет включающий: графическое представление траекторий движения к экстремуму, полученных соответствующими методами; результаты оптимизационных вычислений и проверки их качества; сравнительная характеристика методов оптимизации; заключение.

1.2 Контрольное задание

1. Составить план поиска точки экстремума заданной функции.
2. Составить программы поиска минимума функции.
3. Найти координаты и значение функции в точке минимума одним из методов.
4. Найти точное значение координаты точки минимума, используя необходимые и достаточные условия экстремума, а также стандартные функции MathCad.
5. Проанализировать полученные результаты и сделать выводы по достигнутой точности и количеству вычислений функции.
6. Создать программу поиска глобального экстремума (минимума или максимума) функции путем предварительного разбиения заданного отрезка [a; b] на N непересекающихся подынтервалов для определения локальных экстремумов методом дихотомии и выбора среди них лучшего.

1.3 Варианты заданий

Найти точки экстремумов функций с точностью не хуже ε <0.001. Варианты заданий приведены в таблицах 1 и 2.

Поиск безусловного экстремума функции одной переменной Таблица 1

№ вар.	Целевая функция	Метод безусловного поиска локального экстремума функции одной переменной на отрезке [a; b]	Поиска безусловного глобального экстремума функции одной переменной на отрезке [a; b]
1	$f(x)=\sin(x), x\in[-\pi/2,\pi/2]$	Метод дихотомии	По выбору студента
2	Min: $f(x)=\cos(x),\ x\in[0,\pi]$	Метод Фибоначчи	По выбору студента

3	Min: $f\left(x\right)=\left(x-2\right)^2,\ x\in\left[-2,20\right]$	Метод золотого сечения	По выбору студента
4	Min: $f\left(x\right)=\left(x-15\right)^2+5,\ x\in\left[2,200\right]$.	Метод Ньютона	По выбору студента
5	Min: $f\left(x\right)=\left(x+5\right)^4,\ x\in\left[-10,15\right]$	Метод хорд	По выбору студента
6	Min: $f\left(x\right)=e^x,\ x\in\left[0,100\right]$	Метод модифицированного перебора	По выбору студента
7	Min: $f\left(x\right)=x^2+2x-4,\ x\in\left[-10,20\right]$	Метод дихотомии	По выбору студента
8	Min: $f\left(x\right)=x^3-x,\ x\in\left[0,1\right]$	Метод Фибоначчи	По выбору студента
9	Min: $f\left(x\right)=x^5-x^2,\ x\in\left[0,1\right]$	Метод золотого сечения	По выбору студента
10	Min: $f\left(x\right)=-x/e^x,\ x\in\left[0,3\right]$	Метод Ньютона	По выбору студента
11	Min: $f\left(x\right)=x^4-x,\ x\in\left[0,1\right]$	Метод хорд	По выбору студента
12	Min: $f\left(x\right)=x^4/\ln x,\ x\in\left[1.1,1.5\right]$	Метод средней точки	По выбору студента
13	Min: $f\left(x\right)=\exp(x)+x^2$, [-1; 0]	Метод дихотомии	По выбору студента
14	Min: $f\left(x\right)=\exp(x)+{}^{1}\!/_{x}$, [0.5; 1]	Метод Фибоначчи	По выбору студента
15	Min: $f\left(x\right)=-x+(x+2)/x^2$, [-2; 0]	Метод золотого сечения	По выбору студента
16	Min: $f\left(x\right)=x+{}^{1}\!/_{\ln(x)}$, [-1.5; 3]	Метод Ньютона	По выбору студента
17	Min: $f\left(x\right)=x-\ln(\ln(x))$, [1.3; 3.1]	Метод хорд	По выбору студента
18	Max: $f\left(x\right)=0.2\cdot x+\sin(2x)$, [0; 3]	Метод модифицированного перебора	По выбору студента

Поиск экстремума функции нескольких переменных Таблица 2

№ вар.	Целевая функция и ограничения	Метод поиска условного экстремума функции нескольких переменных	Поиска безусловного экстремума функции нескольких переменных
1	$f(\overline{x})=x_1-2x_2^2+4x_2\rightarrow\max$ $-3x_1-2x_2=6$	Штрафов	По выбору студента
2	$f(\overline{x})=-4x_1^2-8x_1+x_2+3\rightarrow\max$ $-x_1-x_2=2$	Штрафов	По выбору студента
3	$f(\overline{x})=\frac{1}{3}(x_1+1)^3+x_2\rightarrow\min$ $x_1-1\geq 0,\quad x_2\geq 0$	Барьеров	По выбору студента
4	$f(\overline{x})=\frac{4}{x_1}+\frac{9}{x_2}+x_1+x_2\rightarrow\min$ $x_1+x_2\leq 6,\quad x_1\geq 0,\quad x_2\geq 0$	Барьеров	По выбору студента

5	$f(\bar{x}) = 4x_1^2 + 4x_1 + x_2^2 - 8x_2 + 5 \to \min$ $2x_1 - x_2 = 6$	Штрафов	По выбору студента
6	$f(\bar{x}) = -8x_1^2 + 4x_1 - x_2^2 + 12x_2 - 7 \to \max$ $2x_1 + 3x_2 = -6$	Штрафов	По выбору студента
7	$f(\bar{x}) = (x_1 + 4)^2 + (x_2 - 4)^2 \to \min$ $2x_1 - x_2 \le 2, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
8	$f(\bar{x}) = -8x_1^2 + 4x_1 - x_2^2 + 12x_2 - 7 \to \max$ $2x_1 + 3x_2 = -6$	Штрафов	По выбору студента
9	$f(\bar{x}) = (x_1 + 4)^2 + (x_2 - 4)^2 \to \min$ $2x_1 - x_2 \le 2, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
10	$f(\bar{x}) = x_1 - 2x_2^2 + 4x_2 \to \max$ $-3x_1 - 2x_2 = 6$	Штрафов	По выбору студента
11	$f(\bar{x}) = -4x_1^2 - 8x_1 + x_2 + 3 \to \max$ $-x_1 - x_2 = 2$	Штрафов	По выбору студента
12	$f(\bar{x}) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2 \to \min$ $x_1 - 1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
13	$f(\bar{x}) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} + x_1 + x_2 \to \min$ $x_1 + x_2 \le 6, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
14	$f(\bar{x}) = 4x_1^2 + 4x_1 + x_2^2 - 8x_2 + 5 \to \min$ $2x_1 - x_2 = 6$	Штрафов	По выбору студента
15	$f(\bar{x}) = -8x_1^2 + 4x_1 - x_2^2 + 12x_2 - 7 \to \max$ $2x_1 + 3x_2 = -6$	Штрафов	По выбору студента
16	$f(\bar{x}) = (x_1 + 4)^2 + (x_2 - 4)^2 \to \min$ $2x_1 - x_2 \le 2, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
17	$f(\bar{x}) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2 \to \min$ $x_1 - 1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента
18	$f(\bar{x}) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} + x_1 + x_2 \to \min$ $x_1 + x_2 \le 6, \quad x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0$	Барьеров	По выбору студента

При выполнении контрольного задания табл.2 рекомендуется решение задачи оптимизации искать с помощью стандартных средств MathCAD

2 Краткая теория к лабораторной работе

2.1 Численные методы одномерной минимизации.

Задачи поиска экстремума функции означают нахождение ее максимума (наибольшего значения) или минимума (наименьшего значения) в некоторой области определения ее аргументов. Ограничения значений аргументов, задающих эту область, как и прочие дополнительные условия, должны быть определены в виде системы неравенств и (или) уравнений. В таком случае говорят о задаче на условный экстремум. В П2. приводятся примеры различных видов оптимизации (Файл: **Лр8 Примеры 2 Виды Оптимизации функций.xmcd).**

Постановка задачи. Требуется найти безусловный минимум функции одной переменной $Y = F(x)$, то есть, такую точку $x^* \in R$, что $F(x^*) = \min\limits_{x \in R} F(x)$.

2.1 Общая схема методов поиска минимума на отрезке

Пусть функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[a_0, b_0]$. Необходимо найти точку минимума функции на этом отрезке с заданной точностью ε. Все методы одномерного поиска базируются на последовательном уменьшении интервала, содержащего точку минимума.

Возьмем внутри отрезка $[a_0, b_0]$ две точки x_1 и x_2: $a_0 < x_1 < x_2 < b_0$,
и вычислим значения функции в этих точках. Из свойства унимодальности функции можно сделать вывод о том, что минимум расположен либо на отрезке $[a_0, x_2]$, либо на отрезке $[x_1, b_0]$. Действительно, если $f(x_1) < f(x_2)$, то минимум не может находиться на отрезке $[x_2, b_0]$, а если $f(x_1) > f(x_2)$, то минимум не может находиться на отрезке $[a_0, x_1]$. Если же $f(x_1) = f(x_2)$, то минимум находится на интервале $[x_1, x_2]$.

Алгоритм заканчивается, когда длина интервала, содержащего минимум, становится меньше ε. Различные методы одномерного поиска отличаются выбором точек x_1, x_2. Об эффективности алгоритмов можно судить по числу вычислений функции, необходимому для достижения заданной точности. Наибольшее распространение получили следующие методы:

- Метод дихотомии.
- Метод золотого сечения.
- Метод Фибоначчи.
- Метод квадратичной интерполяции (*метод парабол*)

2.1.2 Метод дихотомии (деления отрезка пополам)

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

$$\begin{aligned} x_1 &= (a_i + b_i - \delta)/2, \\ x_2 &= (a_i + b_i + \delta)/2 \end{aligned} \tag{1}$$

За одну итерацию интервал неопределенности уменьшается примерно в два раза (рис. 1). За n итераций длина интервала будет примерно равна $\dfrac{(b_0 - a_0)}{2^n}$. Для достижения точности ε потребуется $n \ge \dfrac{\ln\left((b_0 - a_0)/\varepsilon\right)}{\ln 2}$ итераций. На каждой итерации минимизируемая функция вычисляется дважды.

2.1.2 Метод золотого сечения

Точки x_1, x_2 находятся симметрично относительно середины отрезка $[a_0, b_0]$ и делят его в пропорции золотого сечения, когда длина всего отрезка относится к длине большей его части также, как длина большей части относится к длине меньшей части:

$$\frac{b_0 - a_0}{b_0 - x_1} = \frac{b_0 - x_1}{x_1 - a_0} \text{ и } \frac{b_0 - a_0}{x_2 - a_0} = \frac{x_2 - a_0}{b_0 - x_2}.$$

Отсюда

$$x_1 = a_i + \frac{(3-\sqrt{5})}{2}(b_i - a_i) \approx a_i + 0.381966011 \times (b_i - a_i),$$

$$x_2 = a_i + \frac{(\sqrt{5}-1)}{2}(b_i - a_i) \approx a_i + 0.618003399 \times (b_i - a_i) =$$

$$= b_i - 0.381966011 \times (b_i - a_i).$$

За одну итерацию интервал неопределенности уменьшается в $\frac{\sqrt{5}+1}{2} = 1.618...$ раз, но на следующей итерации мы будем вычислять функцию только один раз, так как по свойству золотого сечения $\frac{x_2 - x_1}{b - x_1} = 0.381...$ и $\frac{b - x_2}{b - x_1} = 0.618...$. Для достижения точности ε потребуется $n \geq \frac{\ln((b_0 - a_0)/\varepsilon)}{\ln\frac{\sqrt{5}-1}{2}}$ итераций.

Неточное задание величины $\sqrt{5}$ на ЭВМ уже при достаточно небольшом количестве итераций может приводить к погрешностям и потере точки минимума, так как она выпадает из интервала неопределенности.

2.2 Численные методы одномерной минимизации с использованием производной

Численные методы одномерной минимизации с использованием производной предполагают, что целевая функция $Y = F(x)$ является выпуклой и дифференцируемой (один раз или дважды). Причем, производная может быть вычислена в произвольно выбранных точках. Считается, что эффективность методов, использующих информацию о производных при поиске точки минимума можно существенно повысить

К основным численным методам одномерной минимизации с использованием производной относят:

- метод средней точки;
- метод хорд;
- метод Ньютона;
- метод кубической аппроксимации и др.

2.2.1 Метод средней точки

Метод средней точки направлен на повышение эффективности метода деления отрезка пополам при использовании технологии исключения отрезков за счет замены вычислений функции в трех точках на операцию вычисления производной в средней точке $\tilde{x} = \frac{a+b}{2}$.

Если $F'(\tilde{x}) > 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного возрастания $F(x)$, поэтому $x^* < \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[a, \tilde{x}]$.

Если $F'(\tilde{x}) < 0$, то точка $\tilde{x}$ лежит на участке монотонного убывания $F(x)$, поэтому $x^* > \tilde{x}$ и точку минимума следует искать на отрезке $[\tilde{x}, b]$.

Равенство $F'(\tilde{x}) = 0$ означает, что точка минимума найдена точно и $x^* = \tilde{x}$.

Такое исключение отрезков требует на каждой итерации только одного вычисления $F'(\tilde{x})$ и уменьшает отрезок поиска точки минимума ровно в два раза.

Поиск заканчивается, если абсолютная величина производной меньше заданной погрешности.

2.2.2 Метод Ньютона

Предполагается, что функция $F(x)$ дважды дифференцируема, причем $F''(x) > 0$. Тогда для поиска корня уравнения $F'(x) = 0$ используется метод касательных. Сущность метода заключается в том, что в очередной точке x_k строится линейная аппроксимация функции $F(x)$ (касательная к графику $F(x)$), а точка, в которой линейная аппроксимирующая функция обращается в нуль, используется в качестве следующего приближения x_{k+1}.

Координата точки x_{k+1} находится по формуле

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F'(x_k)}{F''(x_k)}, \quad k = 0,1,...,$$

где x_0 - начальная точка выбирается пользователем. Вычисления по приведенной формуле продолжаются до тех пор, пока не выполнится условие

$|F'(x_k)| \le \varepsilon$, после чего полагают $x^* = x_k, F^* = F(x^*)$.

Примечание. В связи с выбором начального приближения x_0, удаленного достаточно далеко от искомого решения x^*, возможно, что последовательность $\{x_k\}$ будет расходиться. В этом случае рекомендуется найти лучшее начальное приближение x_0 другим методом (метод золотого сечения и т. д.).

Примеры решения задач поиска минимума (максимума) функции одной переменной рассматриваются в файле: **ЛР 8 Примеры 1 ГлобЭкстремум Метод Монте_Карло.xmcd** приложения П3.

2.3 Поиск безусловного глобального экстремума функции одной переменной

Нелинейные функции в большинстве случаев имеют не один, а несколько экстремумов. Самый большой максимум или минимум называется глобальным экстремумом, остальные локальными. При решении задачи поиска экстремального значения функции, как правило, необходимо определение глобального экстремума. Ниже дается решение такой задачи в MathCAD для заранее заданной области. Вне нее глобальный экстремум может быть другим.

Чтобы найти глобальный максимум (или минимум), требуется либо сначала вычислить все их локальные значения и потом выбрать из них наибольший (наименьший), либо предварительно просканировать с некоторым шагом рассматриваемую область, чтобы выделить из нее подобласть наибольших (наименьших) значений функции и осуществить поиск глобального экстремума, уже находясь в его окрестности. Последний путь таит в себе некоторую опасность уйти в зону другого локального экстремума, но часто может быть предпочтительнее из соображений экономии времени.

Наиболее просты в реализации методы поиска глобальных экстремумов:

1) метод сканирования (с равным и переменным шагом);

2) метод Монте-Карло (случайного поиска).

Примеры решения задач глобальной минимизации (максимизации) функции одной переменной рассматриваются в файле: **ЛР 8 Примеры 3 ГлобЭкстремум Метод Монте_Карло.xmcd** приложения П3**.**

2.4 Градиентные методы поиска безусловного экструмума функции нескольких переменных

Общая задача нелинейного программирования без ограничений состоит в минимизации функции $f(x)=f(x_1, x_2, ..., x_n\}$, заданной во всем n-мерном евклидовом пространстве.

Как правило, численные методы отыскания экстремума состоят в построении последовательности векторов $\{x^{(k)}\}$, удовлетворяющих условию $f(x^{(0)})>f(x^{(1)})>\ldots>f(x^{(n)})$. Методы построения таких последовательностей называются методами спуска. В этих методах элементы последовательности $\{x^{(k)}\}$ вычисляются по формуле

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k\, p^{(k)}, \quad k = 0,1,2\ldots, \qquad (2)$$

где $p^{(k)}$ – направление спуска; α_k – длина шага в этом направлении.

Как известно, градиент функции в некоторой точке $x^{(k)}$ направлен в сторону наискорейшего локального возрастания функции. Следовательно, спускаться нужно в направлении, противоположном градиенту. Вектор, противоположный градиенту, называется антиградиентом. Выбирая антиградиент в качестве направления спуска, приходят к итерационному процессу вида

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k f'\left(x^{(k)}\right), \quad \text{где} \quad f'\left(x^{(k)}\right) \equiv \operatorname{grad} f(x)\Big|_{x=x^{(k)}} \qquad (3)\ .$$

Все методы спуска, в которых вектор $p^{(k)}$ совпадает с антиградиентом, называются градиентными методами. Они отличаются друг от друга только способом выбора шага и выбором направления движения к экстремуму. Наиболее употребительны метод наискорейшего спуска, метод дробления шага, метод покоординатному спуску, метод сопряженных градиентов. В методе наискорейшего спуска величина α_k определяется из условия

$$f\left(x^{(k)} - \alpha_k f'\left(x^{(k)}\right)\right) = \min_{\alpha \ge 0} f\left(x^{(k)} - \alpha f'\left(x^{(k)}\right)\right),$$

т. е. на каждом шаге решается одномерная задача минимизации.

Если f(x) – ограниченная снизу непрерывно дифференцируемая функция и для некоторой начальной точки $x^{(0)}$ множество $\{x: f(x)<f(x^{(0)})\}$ также ограничено, то для метода наискорейшего спуска последовательность $\{x^{(k)}\}$ либо сходится к точке минимума при $k\to\infty$, либо достигает точки минимума за конечное число шагов.

Для минимизации функции может использован метод градиентного спуска с дроблением шага. Процесс (3) с дроблением шага протекает следующим образом. Выбираем некоторое начальное значение $x^{(0)}$. Общих правил выбора $x^{(0)}$ нет; если есть информация об области расположения искомой точки минимума, то точку $x^{(0)}$ выбираем в этой области. Затем выбираем некоторое $\alpha_k = \alpha = const$ и на каждом шаге процесса (4) проверяем условие монотонности $f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$. Если это условие нарушается, то α дробим до тех пор, пока монотонность не восстановится. Для окончания счета можно использовать различные критерии. В итерации прекращаются, если $\left\| \text{grad } f\left(x^{(k+1)}\right) \right\| < \varepsilon$.

В этом случае полагаем $x_{min} = x^{(k+1)}$. Здесь $\left\| \text{grad } f \right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{df}{dx_i} \right)^2}$

Примеры применения градиентных методов для поиска безусловного экстремума функции нескольких переменных содержится в П4. (Файлы: **ЛР8 Пример 4_1 min_grad.xmcd; ЛР 8 Примеры 4.2 min ПокоордСпуска .xmcd**).

2.5 Поиск условного экстремума функции нескольких переменных

2.5.1 Постановка задачи многомерной условной минимизации

Требуется найти минимум функции многих переменных $Y = F(\vec{x})$, то есть, такую точку $\vec{x}^* \in U$, что

$$F(\vec{x}^*) = \min_{\vec{x} \in U} F(\vec{x}), \tag{4}$$

где множество точек U определяется ограничениями вида

$$\begin{aligned} &g_j(\vec{x}) = 0,\ j = 1, \ldots, m,\ m < n, \\ &g_j(\vec{x}) \le 0,\ j = m+1, \ldots, p. \end{aligned} \tag{5}$$

.

2.5.2 Методы условной оптимизации

Применение необходимых и достаточных условий условного экстремума эффективно для решения ограниченного числа задач, в которых имеются аналитические решения. Для решения большинства практических задач используются численные методы, которые можно разделить на две группы:

- методы последовательной безусловной оптимизации;
- методы возможных направлений.

Методы последовательной безусловной оптимизации основаны на преобразовании задачи условной оптимизации в последовательность задач безусловной оптимизации путем введения в рассмотрение вспомогательных функций.

Основная идея методов первой группы состоит в том, чтобы аппроксимировать исходную задачу условной оптимизации некоторой вспомогательной задачей, решение которой менее сложно, чем решение исходной. Однако, при этом приходится решать последовательность таких задач, сходящихся к исходной. Причем, результаты решения предыдущей задачи используются в качестве начальных приближений при решении последующей задачи. Получение решений с практически необходимой точностью может быть достигнуто за конечное число шагов.

Ко второй группе методов относятся:

- метод проекции градиента;
- метод возможных направлений Зойтендейка.

Методы возможных направлений, используемые для решения задачи условной оптимизации, основаны на движении из одной допустимой точки, где выполнены все ограничения, к другой допустимой точке с лучшим значением целевой функции.

Примеры решения задач многомерной условной минимизации (максимизации) функциями MathCAD рассматриваются в П5 (Файл: **ЛР8 Примеры 5 Оптим Функциями МСАДа .xmcd**).

2.5.3. Методы последовательной условной оптимизации

К методам последовательной условной оптимизации относят:

- метод штрафов;
- метод барьеров;
- метод множителей.

В методе штрафов (внешних штрафов) к целевой функции добавляется функция, интерпретируемая как штраф за нарушение каждого из ограничений. В результате генерируется последовательность точек, которая сходится к решению исходной задачи.

В методе барьеров (внутренних штрафов) к целевой функции исходной задачи добавляется слагаемое, которое не позволяет генерируемым точкам выходить за пределы допустимой области.

В методе множителей штрафная функция добавляется не к самой целевой функции, а к ее функции Лагранжа. В результате исследование на экстремум сводится к исследованию модифицированной функции Лагранжа.

В методе точных штрафных функций задача сводится к решению одной задачи безусловной оптимизации.

2.5.3.1. Метод штрафов

Алгоритм метода штрафов состоит из следующих этапов.

1 этап. Задать начальную точку $\bar{x}^0$ вне области допустимых решений, начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$, число $C > 1$ для увеличения параметра штрафа, погрешность расчета $\varepsilon > 0$. Принять $k = 0$.

2 этап. Составить вспомогательную функцию

$$F(\bar{x}, r^k) = f(\bar{x}) + \frac{r^k}{2}\{\sum_{j=1}^{m}[g_j(\bar{x})]^2 + \sum_{j=m+1}^{p}[g_j^+(\bar{x})]^2\},$$

где функция штрафа $P(\bar{x}, r^k) = \frac{r^k}{2}\{\sum_{j=1}^{m}[g_j(\bar{x})]^2 + \sum_{j=m+1}^{p}[g_j^+(\bar{x})]^2\}$ - квадрат срезки.

$g_j^+(\bar{x})$ - срезка функции:

$$g_j^+(\bar{x}) = \max\{0, g_j(\bar{x})\} = \begin{cases} g_j(\bar{x}), & g_j(\bar{x}) > 0, \\ 0, & g_j(\bar{x}) \le 0. \end{cases}$$

3 этап. Найти точку $\bar{x}^*(r^k)$ безусловного минимума функции $F(\bar{x}, r^k)$ по $\bar{x}$ с помощью какого либо метода (нулевого, первого или второго порядка): $F(\bar{x}^*(r^k), r^k) = \min\limits_{x \in R^n} F(\bar{x}, r^k)$. При этом задать все требуемые выбранным методом параметры. В качестве начальной точки взять $\bar{x}^k$. Вычислить функцию штрафа $P(\bar{x}^*(r^k), r^k) = \frac{r^k}{2}\{\sum_{j=1}^{m}[g_j(\bar{x}^*)]^2 + \sum_{j=m+1}^{p}[g_j^+(\bar{x}^*)]^2\}$.

4 этап. Проверить выполнение условия окончания:

А) если $P(\bar{x}^*(r^k), r^k) \le \varepsilon$, процесс поиска закончить: $\bar{x}^* = \bar{x}^*(r^k), \quad f(\bar{x}^*) = f(\bar{x}^*(r^k))$;

Б) если $P(\bar{x}^*(r^k), r^k) > \varepsilon$, то принять $r^{k+1} = Cr^k, \quad \bar{x}^{k+1} = \bar{x}^*(r^k), k = k+1$ и перейти к этапу 2.

Примечание. Рекомендуемые значения $r^0 = 0.01, 0.1, 1$, параметра $C = 4 - 10$.

2.5.3.2. Метод барьерных функций

Алгоритм метода барьерных функций состоит из следующих этапов.

1 этап. Задать начальную точку $\bar{x}^0$ внутри области U, начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$, число $C > 1$ для уменьшения величины параметра штрафа, погрешность расчета $\varepsilon > 0$. Принять $k = 0$.

2 этап. Составить вспомогательную функцию

$$F(\bar{x}, r^k) = f(\bar{x}) - r^k \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{g_j(\bar{x})} \quad \text{или} \quad F(\bar{x}, r^k) = f(\bar{x}) - r^k \sum_{j=1}^{m} \ln(-g_j(\bar{x})).$$

3 этап. Найти точку $\bar{x}^*(r^k)$ безусловного минимума функции $F(\bar{x}, r^k)$ по $\bar{x}$ с помощью какого либо метода (нулевого, первого или второго порядка):
$F(\bar{x}^*(r^k), r^k) = \min\limits_{x \in R^n} F(\bar{x}, r^k)$ с проверкой принадлежности текущей точки внутренности множества U. При этом задать все требуемые выбранным методом параметры. В качестве начальной точки взять $\bar{x}^k$.

Вычислить функцию штрафа $P(\bar{x}^*(r^k), r^k) = -r^k \sum\limits_{j=1}^{m} \dfrac{1}{g_j(\bar{x}^*(r^k))}$ (обратная функция штрафа) или $P(\bar{x}^*(r^k), r^k) = -r^k \sum\limits_{j=1}^{m} \ln[-g_j(\bar{x}^*(r^k))]$ (логарифмическая функция штрафа).

4 этап. Проверить выполнение условия окончания:

А) если $\left| P(\bar{x}^*(r^k), r^k) \right| \le \varepsilon$, то процесс поиска закончить, приняв $\bar{x}^* = \bar{x}^*(r^k), \quad f(\bar{x}^*) = f(\bar{x}^*(r^k))$;

Б) если $\left| P(\bar{x}^*(r^k), r^k) \right| > \varepsilon$, то принять $r^{k+1} = \dfrac{r^k}{C}, \quad \bar{x}^{k+1} = \bar{x}^*(r^k), k = k+1$ и перейти к этапу 2.

Примечание. Рекомендуемые значения $r^0 = 1,10,100$, параметра $C = 10,12,16$.
Примеры применения методов последовательной условной оптимизации содержится в П6 (Файл: **ЛР 8 Примеры 6 Оптим Функц МСАДа и ШтрафФунк.xmcd**).

3 Поиск экстремума функции в системе MathCAD.

Для решения задач поиска максимума и минимума в Mathcad имеются встроенные функции Minerr, Minimize и Maximize. Все они используют те же градиентные численные методы, что и функция Find для решения уравнений. Поэтому Вы можете выбирать численный алгоритм минимизации аналогично тому, что было в рассмотренных численных методах предыдущих лабораторных работах (например, ЛР 3 и ЛР 5).

Поиск экстремума функции включает в себя задачи нахождения локального и глобального экстремума. В Mathcad с помощью встроенных функций решается только задача поиска локального экстремума. Для поиска локальных экстремумов имеются две встроенные функции, которые могут применяться как в пределах вычислительного блока, так и автономно.

- Minimize (f, x1,…,xм) – вектор значений аргументов, при которых функция f достигает минимума;
- Maximize (f, x1,…,xм) – вектор значений аргументов, при которых функция f достигает максимума;
    - f (x1,…, xм,…) – функция;
    - x1,…, xм – аргументы, по которым производится минимизация (максимизация).

Всем аргументам функции f предварительно следует присвоить некоторые значения, причем для тех переменных, по которым производится минимизация, они будут восприниматься как начальные приближения. Примеры вычисления экстремума функции одной переменной без дополнительных условий содержится в файле П2: **Лр8 Примеры 2 Виды Оптимизации функций.xmcd.** Поскольку никаких дополнительных условий в них не вводится, поиск экстремумов является безусловным и выполняется для любых значений. Как видно из приведенного примеров применения функций MathCAD **Minimize (Maximize**), существенное влияние на результат оказывает выбор начального приближения, в зависимости от чего в качестве ответа выдаются различные локальные экстремумы.

В задачах на условный экстремум функции минимизации и максимизации должны быть включены в вычислительный блок, т. е. им должно предшествовать ключевое слово **Given**. В промежутке между **Given** и функцией поиска экстремума с помощью булевых операторов записываются логические выражения (неравенства, уравнения), задающие ограничения на значения аргументов минимизируемой (максимизируемой) функции. Вычисление экстремума функции многих переменных не несет принципиальных особенностей по сравнению с функциями одной переменной.

Примеры поиска условного экстремума на различных интервалах, определенных неравенствами содержится в файле приложения П5 (**Файл ЛР8 Примеры 5 Оптим Функциями МСАДа .xmcd).**

4 Вопросы самоконтроля.

1. Для каких функций эффективно применение методов типа дихотомии, золотого сечения, Фибоначчи?
2. Количество вычислений минимизируемой функции на одну итерации в методе дихотомии? В методе золотого сечения? В методе Фибоначчи?
3. Редукция интервала неопределенности в методе дихотомии? В методе золотого сечения? В методе Фибоначчи?
4. Что собой представляют градиентные методы?
5. Алгоритм наискорейшего спуска? Выбор величины шага в алгоритме наискорейшего спуска?
6. Метод сопряженных градиентов Флетчера-Ривса? Для каких функций алгоритм сходится за n шагов? Что должно быть предусмотрено в алгоритме при минимизации произвольных функций?
7. Чем отличается алгоритм метода сопряженных градиентов?
8. В чем заключается идея метода штрафных функций? Какая последовательность задач решается в этом случае?
9. На что накладывается штраф?
10. Зачем увеличивается коэффициент штрафа?
11. Понятие штрафной функции.
12. Где выбирается начальная точка поиска?
13. Как формируется расширенный критерий оптимальности?
14. От чего зависит точность нахождения оптимума исходной задачи?
15. В чем отличие метода штрафных функций от метода барьерных функций?
16. Виды функций штрафа и барьерных функций?
17. Простой случайный поиск?
18. Направленный случайный поиск и ненаправленный? В чём различие?
19. Примеры направленного случайного поиска?
20. Примеры ненаправленного случайного поиска?
21. Примеры построения алгоритмов глобального поиска?

Литература

1. **Зайцев. В.В.** Численные методы для физиков. Нелинейные уравнения и оптимизация: учебное пособие / В.В.Зайцев. В.М.Трешев. - Самара, 2005.-86 с.: ил.I3.

2. **Пантелеев А.В., Летова Т.А.** Методы оптимизации в примерах и задачах: Учебное пособие. – М.: Высш. шк., 2002. -544с.
3. **Лесин В.В., Лисовец Ю.П.** Основы методов оптимизации: Учебное пособие. – СПб.: Издательство «Лань», 2011. – 352 с.
4. Методы оптимизации. Методические указания к лабораторным работам для студентов III курса ФПМИ (направление 010500 – “Прикладная математика и информатика” дневного отделения). Новосибирск, 2011.

Приложение.

Примеры решения задач поиска численных экстремумов функций средств MathCad

П 1. Методы одномерной числовой оптимизации (Файл: Лр 8 Примеры 1 Одномерной оптимизации программ-функциями.xmcd)

1.1. Поиск экстремума аналитической функции f(x) на основе необходимых и достаточных условий
1.2. 0дномерная минимизация методом Фибоначчи.
1.3. Одномерная оптимизация методом золотого сечения
1.4. Поиск максимума (минимума) целевой функции f(x) с помощью метода средней точки
1.5. Поиск минимума целевой функции f(x) с помощью метода Ньютона
1.6. Поиск минимума целевой функции f(x) с помощью метода Хорд

П2. Примеры решения задач разных виды оптимизации функций действительных переменных функциями MathCad (Файл: Лр8 Примеры 2 Виды Оптимизации функций.xmcd)

2.1. Примеры поиска безусловной (условного) экстремума функции одной переменной функциями Minimize (Maximize)
2.2. Экстремум функции многих переменных
2.3. Способы поиска безусловного глобального экстремума

П3. Способы поиска глобального экстремума функции одной переменной в заданной области методом Монте Карло и детерминированным сканированием. (файл: ЛР 8 Примеры 3 ГлобЭкстремум Метод Монте_Карло.xmcd)

3.1. Поиск глобального минимума методом случайного (равномерного) сканирования
3.2. Поиск глобального экстремума методом детерминированного сканирования
3.3. Уточнение глобального максимума функции методом дихотомии

П4. Примеры решения задач безусловной оптимизации функции многих переменных (файл:ЛР8 Пример 4_1 min_grad.xmcd);Файл: ЛР 8 Примеры 4.2 min ПокоордСпуска .xmcd)

4.1. Безусловная минимизация функций многих переменных градиентным методом (постановка задачи и описание программной реализации) Пример 1. Поиск минимума функции одной переменной
Пример 2. Поиска минимума функции двух переменных
Пример 3. Поиск минимума функции трёх переменных
4.2. Безусловная минимизация функций многих переменных методом покоординатного спуска
4.2.1. Одномерная минимизация: аналитическим методом и методом Фибоначчи.
4.2.2. Многомерная оптимизация. Метод покоординатного спуска.

П5. Поиск экстремумов целевых функций встроенными средствами MathCAD (Файл ЛР8 Примеры 5 Оптим Функциями МСАДа .xmcd)

П6. Примеры решения задач условной оптимизации функции многих переменных функциями MathCad и методом штрафных (барьерных) функций. (Файл: ЛР 8 Примеры 6 Оптим Функц МСАДа и ШтрафФунк.xmcd)
6.1. Условный и безусловный экстремум функции одной переменной
6.2. Условный экстремум функции многих переменных функциями MathCad
Пример 1. Условная оптимизация целевой функции методом штрафных функций с помощью стандартных функций MathCAD (ограничения в виде неравенств)
Пример 2. Условная оптимизация целевой функции методом штрафных функций с помощью стандартных функций MathCAD (ограничения в виде равенств)
Пример 3. Поиск условного экстремума с помощью штрафной функции (с управляемым вручную коэффициентом влияния штрафа: параметр r)
Пример 4. Условная оптимизация целевой функции методом барьерных функций с помощью стандартных функций MathCAD (ограничения в виде неравенств).