ЛЕКЦИЯ №9. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ НП-ЗАДАЧ

ПЛАН

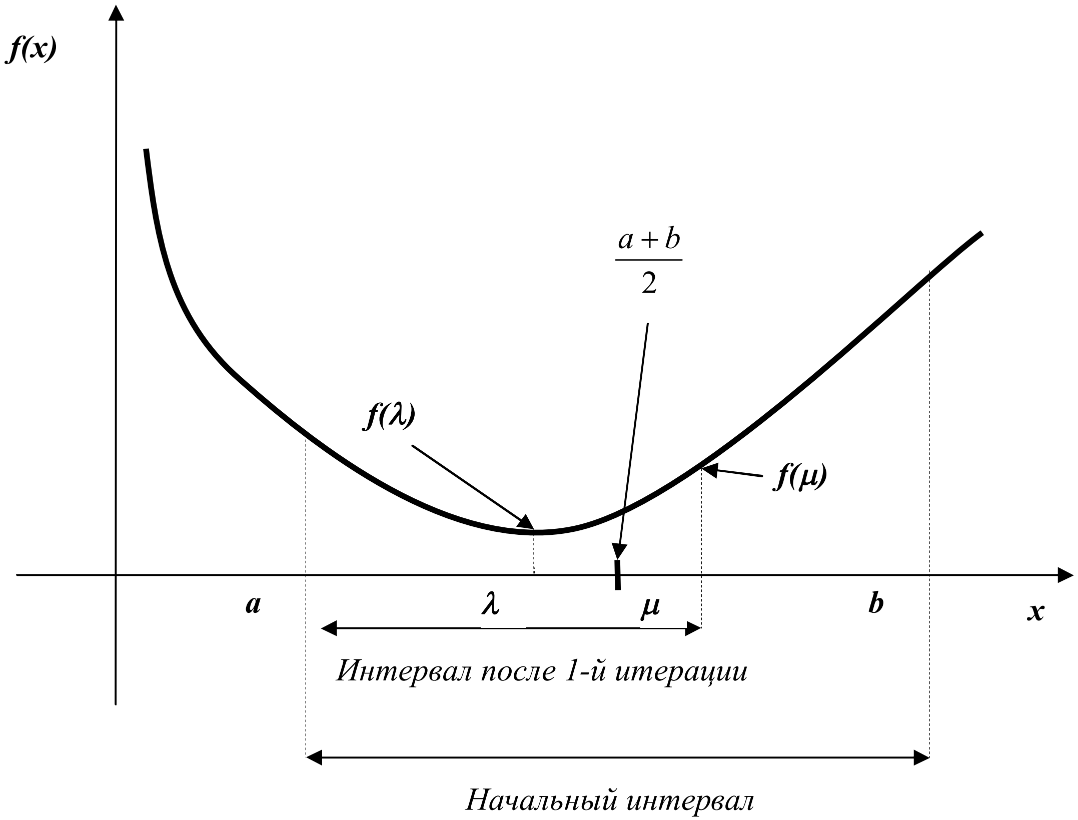
1. Прямые методы поиска экстремумов
2. Градиентные методы поиска экстремумов
3. Методы переменной метрики поиска экстремумов
4. Методы возможных направлений
5. Методы штрафных функций

ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА

- **Дихотомический поиск**

Входные данные. Интервал поиска [a, b]; точность расчётов $l > 0$; константа различимости ε.

Условие окончания: $b\text{-}a \le l$.



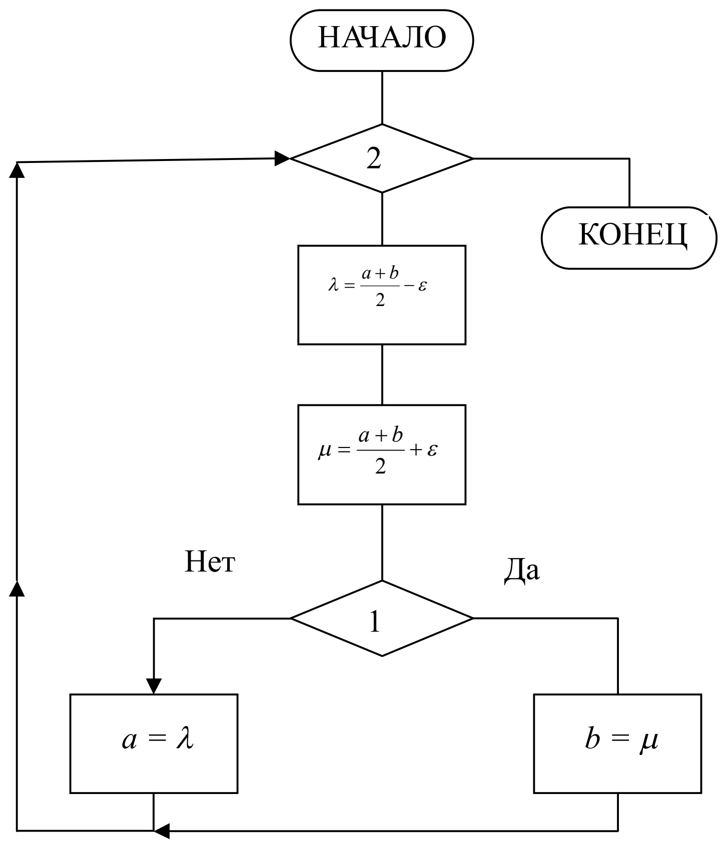
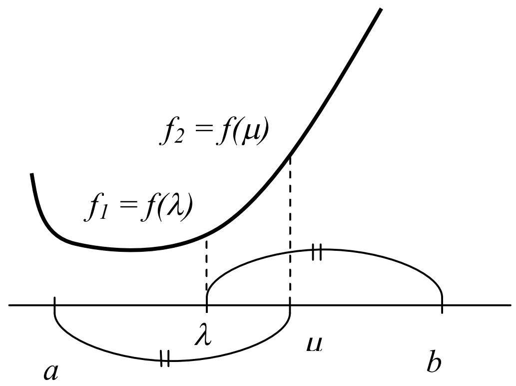


Рисунок 1 – Схема алгоритма дихотомического метода

- **Метод золотого сечения**

- интервал поиска сужается равномерно $b_k - a_k = \alpha^k\,(b - a)$;
- параметры точек сравнения и концов интервала соотносятся следующим образом

$$b - \lambda = \mu - a.$$



$$\lambda = a + (1 - \alpha)\times(b - a)$$
$$\mu = a + \alpha\times(b - a),$$

где $|\alpha| < 1$ (Коэффициент золотого сечения $\alpha = 0{,}618\ldots$)

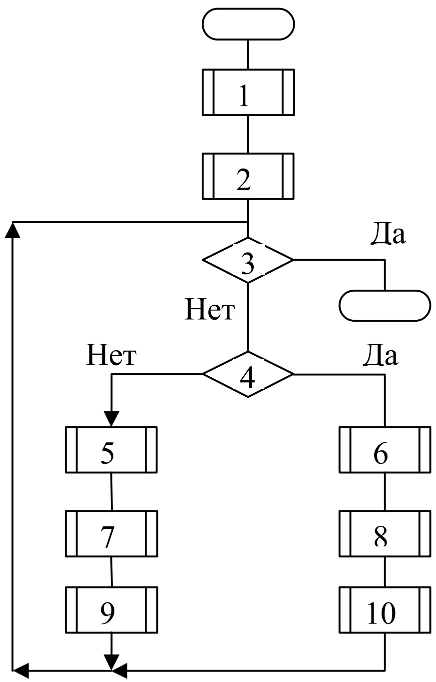


Рисунок 2 – Алгоритм метода золотого сечения

- **Метод Фибоначчи**

- на каждой итерации изменяет коэффициент сжатия интервала и
- выполняется заранее известного числа шагов.

Ряд Фибоначчи

$$F_{n+1} = F_n + F_{n\text{-}1},\ \mathrm{F}_0 = F_1 = 1$$

$$\frac{b-a}{l} < F_n \Rightarrow n$$

$$\lambda_k = a_k + \frac{F_{n-k-1}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k)$$

$$\mu_k = a_k + \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k)$$

$$b_{k+1} - a_{k+1} = \frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}(b_k - a_k) = b_k - \lambda_k = \mu_k - a_k$$

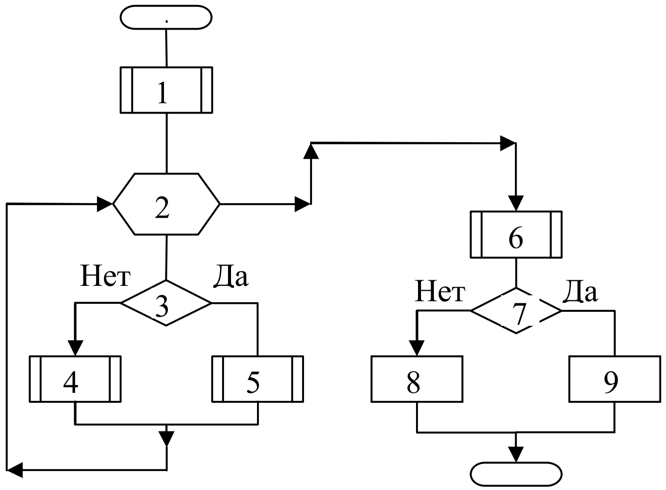


Рисунок 3 – Алгоритм метода Фибоначчи

МНОГОМЕРНЫЙ ПОИСК

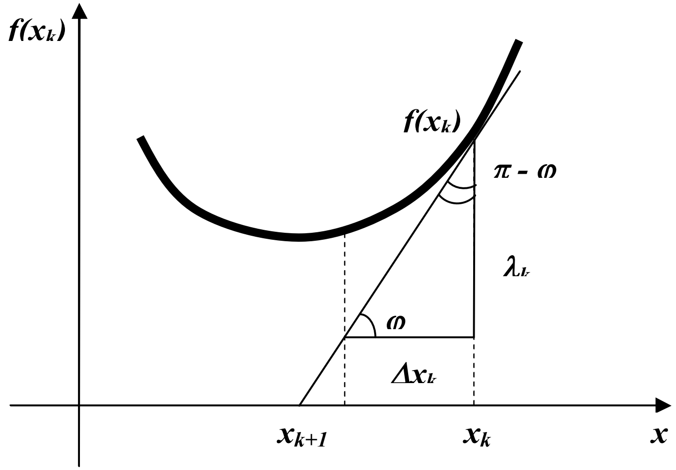
- **Метод конфигураций**

Он же метод траекторий или метод Хука и Дживса.
Идея.

- Направления поиска ориентированы, так сказать, по сторонам света или вдоль осей координат в обе стороны.
- Вокруг текущей точки производится поиск направления, в котором функция убывает.
- Если такое направление найдено, то шаг поиска увеличивается, а поиск продолжается в выбранном направлении – устанавливается так называемый тренд поиска, и осуществляется до тех пор, пока функция в этом направлении убывает.
- Если факта убывания функции не обнаружено, то шаг поиска уменьшается.

Делается попытка найти «овраг» (при минимизации) функции и двигаться вдоль него к точке минимума, а в задачи максимизации ищется «хребет».

ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА



$$x_{k+1} = x_k - \Delta x_k$$

Рисунок 4 – Использование градиента

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \times \nabla f(x_k), \qquad (2.61)$$

где $\lambda_k > 0$ – величина шага на k-ой итерации. Все особенности градиентных методов заключаются в приёмах определения λ_k на каждой итерации.

- **Метод наискорейшего спуска (подъёма)**

$$\lambda_k^* \Rightarrow \min_{\lambda>0} f(X_k + \lambda s_k)$$

где $s_k = -\nabla f(X_k)$ определяется градиентом. При этом непосредственно значение λ_k может быть определено из уравнения

$$\frac{\partial f(X_k + \lambda s_k)}{\partial \lambda} = 0$$

аналитически, либо путём численного решения задачи одномерной минимизации.

- **Метод Ньютона (вторых производных)**

$$f(X) \cong f(X_0) + \nabla^T f(X_0)(X - X_0) + \frac{1}{2}(X - X_0)^T \nabla^2 f(X_0)(X - X_0),$$

где $\nabla^T f(X_0)$ – матрица Гёссе, составленная из частных производных второго порядка.

$$\Delta X_k = -\frac{\nabla f(X_k)}{\nabla^2 f(X_k)} \Rightarrow X_{k+1} = X_k - \frac{\nabla f(X_k)}{\nabla^2 f(X_k)}.$$

- **Метод сопряжённого градиента (Флетчера - Ривса)**

Понятие о сопряжённых направлениях

Система линейно-назависимых направлений поиска S_1, S_2, ...S_{n-1} называется ***сопряжённой*** по отношению к некоторой положительно определённой матрице Q если

$$S_i^T Q S_j = 0; \quad i \neq j; \quad i = 1, \overline{n-1}, \quad j = 1, \overline{n-1}.$$

$$S_n = -\nabla f(x_n)$$

Сопряжённое направление

$$S_{n+1} = -\nabla f(x_{n+1}) + \omega_{n+1} S_n$$

где ω_{n+1} – весовой коэффициент сопряжения.

$$\omega_{n+1} = \frac{\nabla^T f(x_{n+1}) \cdot \nabla f(x_{n+1})}{\nabla^T f(x_n) \cdot \nabla f(x_n)} = \frac{\left\|\nabla f(x_{n+1})\right\|^2}{\left\|\nabla f(x_n)\right\|^2}. \qquad (2.71)$$

- **Методы поиска переменной метрики (квазиНьютоновские)**

Алгоритм движения точки

$$x_{n+1} = x_n - \lambda_n D_n \nabla f(x_n)$$

где D_n - аппроксимирующая матрица, λ_n - стабилизирующий множитель.
Аппроксимирующая матрица D_n строят по правилу:

$$H^{-1}(x_n) \approx D_{n+1} = \omega(D_n + \Delta D_n)$$

ω - нормирующий множитель.

$$\Delta D_n = \frac{1}{\omega} \cdot \frac{\Delta x_n}{\Delta g_n^T} \cdot \frac{Y^T}{Y} - \frac{D_n \Delta g_n}{\Delta g_n^T} \cdot \frac{Z^T}{Z}$$

В алгоритме, предложенном ***Бройденом***, положено: $\omega = 1,\ Y = Z = \Delta x_n - D_n \Delta g_n$.
В алгоритме ***Давидона-Флетчера-Пауэлла*** аналогичные: $\omega = 1,\ Y = \Delta x_n,\ Z = D_n \Delta g_n$.

$$D_{n+1} = D_n + \frac{\Delta x_n}{\Delta g_n^T} \cdot \frac{\Delta x_n^T}{\Delta x} - \frac{D_n \Delta g_n}{\Delta g_n^T} \cdot \frac{(D_n \Delta g_n)^T}{D_n \Delta g_n} = D_n + A_n - B_n$$

МЕТОДЫ ВОЗМОЖНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

Определение. Вектор с ненулевыми компонентами (ненулевой) S называется ***возможным направлением*** спуска в точке $X \in \Re$, если существует $\delta > 0$, такое, что $X + \lambda S \in \Re$ для всех $\lambda \in (0, \delta)$ и $f(X + \lambda S) < f(X)$.

- Методы Зойтендейка

- **Случай линейных ограничений**

$$\min f(X)$$

$$\begin{cases} AX \le b, \\ HX = h, \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 X = b_1, \\ A_2 X < b_2. \end{cases}$$

$$\begin{cases} A^T = \begin{bmatrix} A_1^T & A_2^T \end{bmatrix}, \\ b^T = \begin{bmatrix} b_1^T & b_2^T \end{bmatrix}. \end{cases}$$

Условия:

$$\begin{cases} A_1 S \le 0, \\ HS = 0, \end{cases}$$

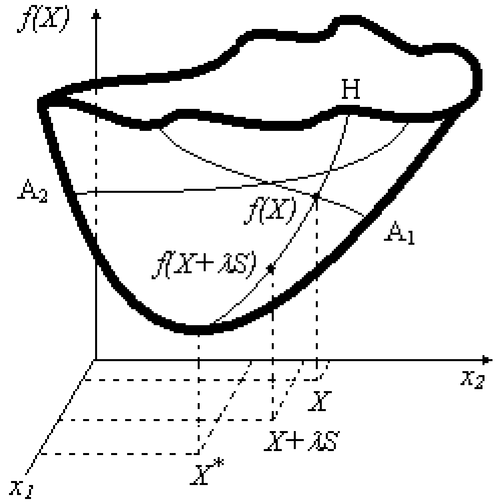


Рисунок 5 – К пояснению выбора направления

Требования нормировки:

- на величину элементов $-1 \le s_i \le 1,\ j = 1,\overline{n}$;
- на модуль вектора возможного направления S $S^T S \le 1, \|S\|^2 \le 1$, это ограничения объединяет условия $-1 \le s_j \le 1, j = 1,\overline{n}$ и $\sum_{j=1}^{n} s_i \le 1, \sum_{j=1}^{n} s_i \ge -1$;
- на величину целевой функции ЗЛП $\nabla^T f(X)S \ge -1$.

$$
\begin{array}{ccc}
\min \nabla^T f(X)S & \min \nabla^T f(X)S & \min \nabla^T f(X)S \\
\begin{cases} A_1 S \le 0, \\ HS = 0, \\ s_j \le 1, \\ s_j \ge -1, \quad j = 1, m. \end{cases} &
\begin{cases} A_1 S \le 0, \\ HS = 0, \\ S^T S \le 1. \end{cases} &
\begin{cases} A_1 S \le 0, \\ HS = 0, \\ \nabla^T f(X)S \ge -1. \end{cases} \\
1) & 2) & 3)
\end{array}
\qquad (2.85)
$$

- **Случай нелинейных ограничений**

Рассмотрим задачу НП-программирования вида

$$\min f(X);$$

$$\begin{cases} g_i(X) \le 0, & i = 1,\overline{m}; \\ x_j \ge 0, & j = 1,\overline{n}. \end{cases}$$

Пусть текущая точка X является допустимой точкой, а $I = \{i : g_i(X) = 0\}$ – множество ограничений, активных в этой точке. Если

$$\begin{cases} \nabla^T f(X)S < 0, \\ \nabla^T g_i(X)S < 0, \; i \in I, \end{cases}$$

то S – вектор возможного направления спуска в этой точке.

1. Найти множество активных ограничений задачи в текущей точке $I = \{i : g_i(X) = 0\}$ и решить ЗЛП вида

$$\min z$$

$$\begin{cases} \nabla^T f(X)S - z \le 0, \\ \nabla^T g_i(X)S - z \le 0, \; i \in I = \{i : g_i(X) = 0\}. \end{cases}$$

улучшенный

$$\min z$$

$$\begin{cases} \nabla^T f(X)S - z \le 0, \\ \nabla^T g_i(X)S - z \le -g_i(X), \; i = 1, m. \end{cases}$$

при любом, оговоренном выше, условии нормировки компонентов вектора возможного направления S.

- Метод проекции градиента Розена

$$\min f(X)$$

$$\begin{cases} AX \le b, \\ HX = h, \end{cases}$$

Направление спуска

$$S = -P \times \nabla f(X),$$

где P – матрица проецирования

$$P = I - M^T \times (M \times M^T)^{-1} \times M,$$

где I – единичная матрица, $M^T = [A_1{}^T H^T]$ – невырождена.

МЕТОДЫ ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

Пусть условия задачи имеют вид

$$\min f(X);$$

$$\begin{cases} h_i(X) = 0, & i = \overline{1, m}; \\ g_i(X) \geq 0, & i = \overline{m+1, l}. \end{cases}$$

Можно построить следующую фунцию без ограничений:

$$P(X, \rho) = f(X) + \sum_{i=1}^{m} \rho_i H[h_i(X)] + \sum_{i=m+1}^{l} \rho_i G[g_i(X)]$$

СВОЙСТВА ФУНКЦИОНАЛОВ

Функционал $H[h_i(X)]$ должен сделать невыгодным любое отклонение аргумента X от поверхности $h_i(X) = 0$, то есть

$$\lim_{h_i(X)\to 0} H[h_i(X)] = 0, \quad i = \overline{1,m}.$$

Поэтому в качестве функционала выбирают чётную степенную функцию

$H[y] = y^p$, $p = 2,4,\ldots$ либо $H[y] = |y|^p$, $p = 1,3,\ldots$

Функционал $G[g_i(X)]$ зависит от местоположения текущей точки в процессе решения.

- **Метод внутренней точки**:

$$\lim_{g_i(X)\to 0^+} G[g_i(X)] = \infty, \; i = \overline{m+1,l} \text{ для } g_i(X) > 0 .$$

- **Метод внешней точки**:

$$\lim_{g_i(X)\to 0^-} G[g_i(X)] = 0, \; i = \overline{m+1,l} \text{ для } g_i(X) < 0 .$$

- **Комбинированный метод**:

$$G[g_i(X)] > 0 \text{ для } g_i(X) < 0, \; i = \overline{m+1,l} .$$

$$G[g_i(X)] = 0 \text{ для } g_i(X) = 0, \; i = \overline{m+1,l} .$$

$$\lim_{k\to\infty}\sum_{i=1}^{m}\rho_{i,k}H[h_i(X_k)]=0, \lim_{k\to\infty}\sum_{i=m+1}^{l}\rho_{i,k}G[g_i(X_k)]=0, \lim_{k\to\infty}\left|P(X_k,\rho_k)-f(X_k)\right|=0,$$

где k – номер итерации.

- **Метод барьерных поверхностей (МБП)**

$$\min f(X);$$

$$\begin{cases} g_i(X)\ge 0, & i=\overline{1,m}; \\ x_j\ge 0, & j=\overline{1,n}. \end{cases}$$

$$P(X,r,\Omega)=f(X)+r\cdot\sum_{i=1}^{m}\omega_i G[g_i(X)]$$

$$G[Y]={}^{1}\!/_{Y}, G[Y]=-\ln[Y]$$

- **Метод внешней точки**

$$\min f(X);$$

$$\begin{cases} h_i(X) = 0, & i = \overline{1, m}; \\ g_i(X) \geq 0, & i = \overline{m+1, l}. \end{cases}$$

$$P(X, r) = f(X) + rL(X),$$

где r – коэффициент штрафа, а штраф

$$L(X) = \sum_{i=1}^{m} H[h_i(X)] + \sum_{i=m+1}^{l} G[g_i(X)]$$

Используются функционалы:

$G[Y] = [\max\{0; -Y\}]^P$, $P > 0$, целое.
$H[Y] = |Y|^P$, $P > 0$, целое.