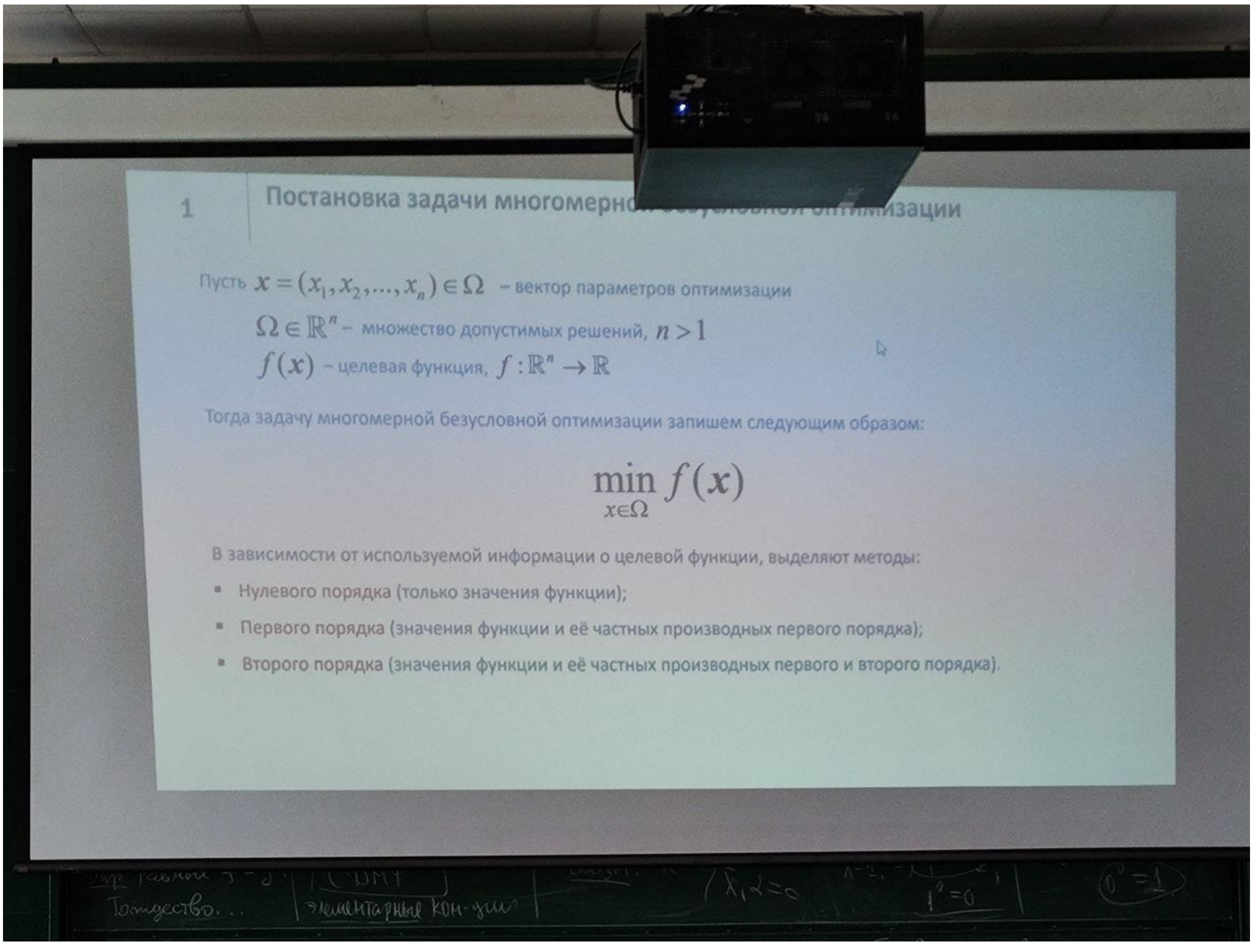
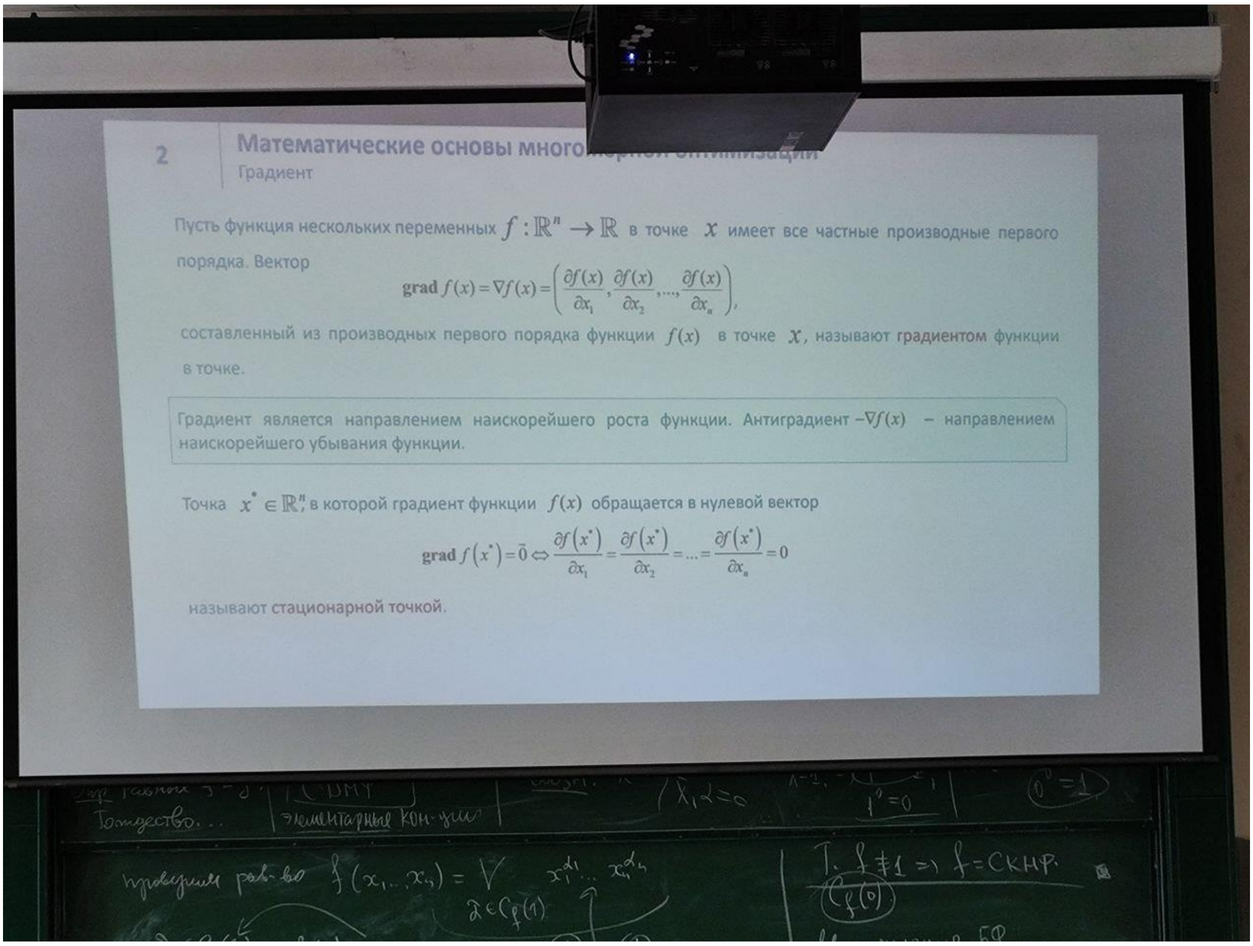
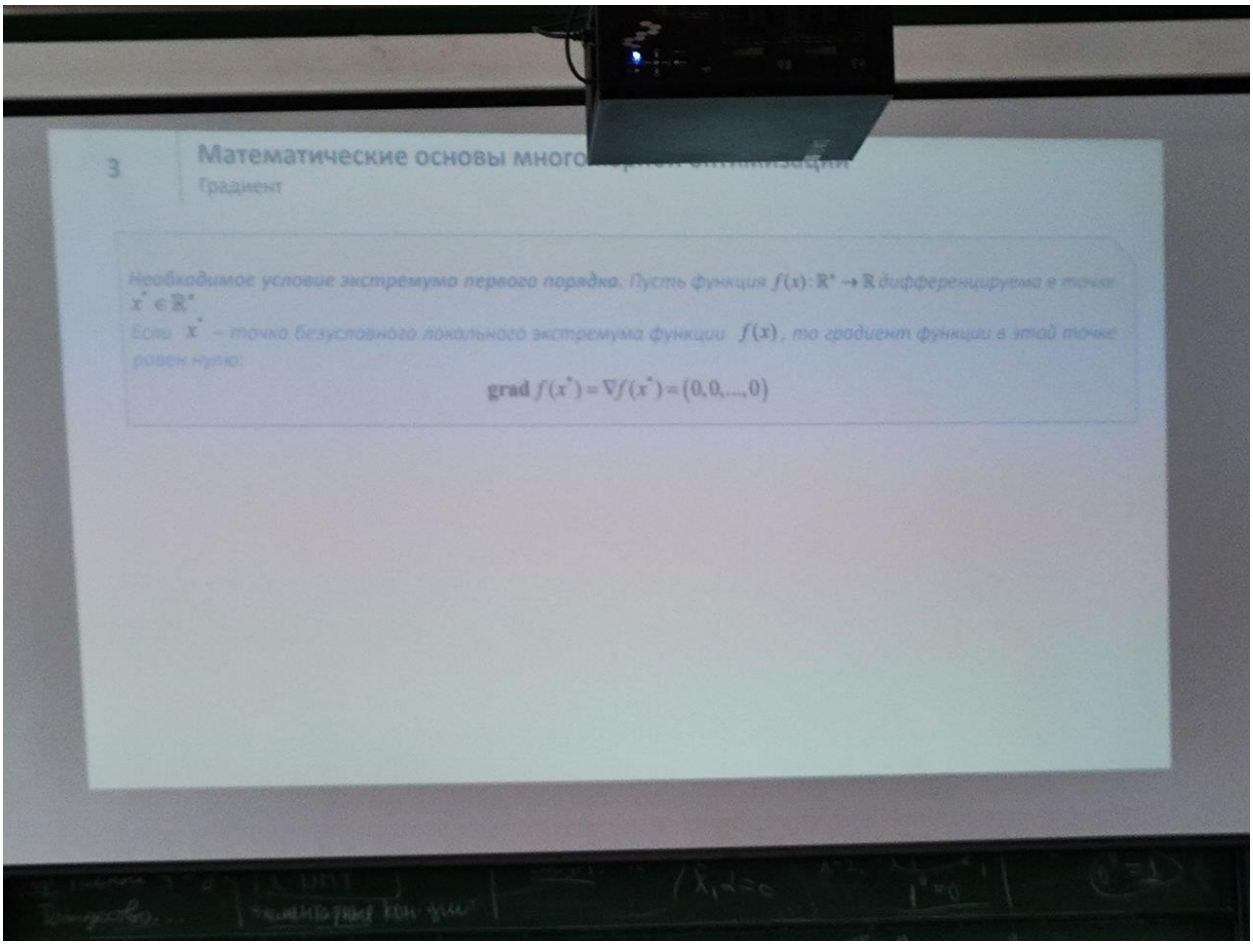
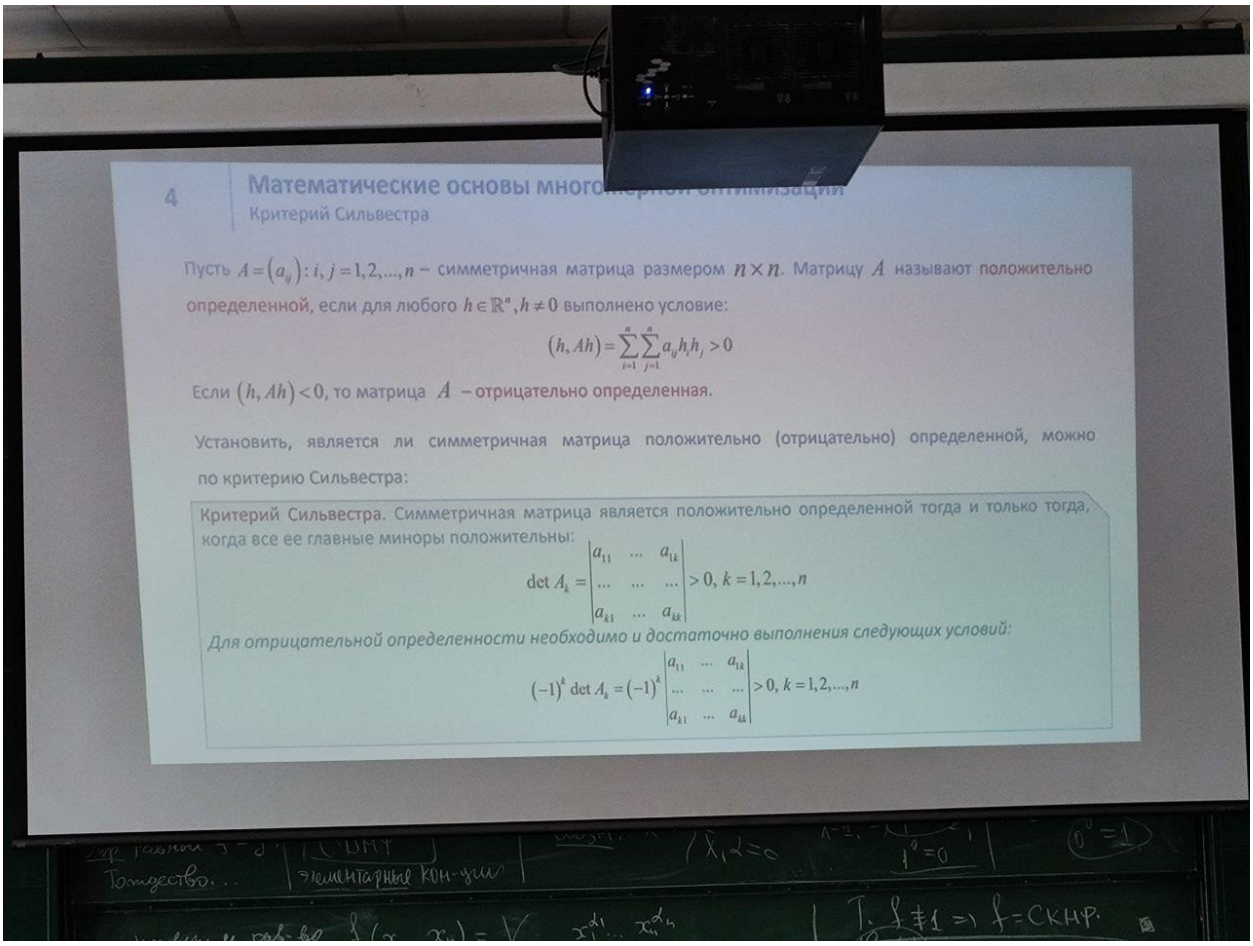

1
Постановка задачи многомерной безусловной оптимизации
Пусть $x=(x_1,x_2,...,x_n)\in\Omega$ – вектор параметров оптимизации
$\Omega\in\mathbb{R}^n$ – множество допустимых решений, $n>1$
$f(x)$ – целевая функция, $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$
Тогда задачу многомерной безусловной оптимизации запишем следующим образом:
$$\min_{x\in\Omega} f(x)$$
В зависимости от используемой информации о целевой функции, выделяют методы:
Нулевого порядка (только значения функции);
Первого порядка (значения функции и её частных производных первого порядка);
Второго порядка (значения функции и её частных производных первого и второго порядка).


2
Математические основы многомерной оптимизации
Градиент
Пусть функция нескольких переменных $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ в точке x имеет все частные производные первого порядка. Вектор
$$\mathbf{grad}\, f(x)=\nabla f(x)=\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1},\frac{\partial f(x)}{\partial x_2},...,\frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right),$$
составленный из производных первого порядка функции $f(x)$ в точке x, называют градиентом функции в точке.
Градиент является направлением наискорейшего роста функции. Антиградиент $-\nabla f(x)$ – направлением наискорейшего убывания функции.
Точка $x^*\in\mathbb{R}^n$, в которой градиент функции $f(x)$ обращается в нулевой вектор
$$\mathbf{grad}\, f(x^*)=\bar{0}\Leftrightarrow\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_1}=\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_2}=...=\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_n}=0$$
называют стационарной точкой.


3
Математические основы много
Градиент
Необходимое условие экстремума первого порядка. Пусть функция $f(x):\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ дифференцируема в точке $x^* \in \mathbb{R}^n$.
Если x^* – точка безусловного локального экстремума функции $f(x)$, то градиент функции в этой точке равен нулю:
$\mathbf{grad}\, f(x^*) = \nabla f(x^*) = (0,0,\ldots,0)$


4
Математические основы много
Критерий Сильвестра
Пусть $A=(a_{ij}): i,j=1,2,\ldots,n$ – симметричная матрица размером $n\times n$. Матрицу A называют положительно определенной, если для любого $h\in\mathbb{R}^n, h\neq 0$ выполнено условие:
$(h, Ah)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}h_ih_j>0$
Если $(h, Ah)<0$, то матрица A – отрицательно определенная.
Установить, является ли симметричная матрица положительно (отрицательно) определенной, можно по критерию Сильвестра:
Критерий Сильвестра. Симметричная матрица является положительно определенной тогда и только тогда, когда все ее главные миноры положительны:
$\det A_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1k} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{k1} & \ldots & a_{kk} \end{vmatrix} > 0,\ k=1,2,\ldots,n$
Для отрицательной определенности необходимо и достаточно выполнения следующих условий:
$(-1)^k \det A_k = (-1)^k \begin{vmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1k} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{k1} & \ldots & a_{kk} \end{vmatrix} > 0,\ k=1,2,\ldots,n$

5 Математические основы многомерной оптимизации

Неотрицательная и неположительная определенность матриц

Теорема. *Необходимым и достаточным условием неотрицательной определенности симметричной матрицы A (или квадратичной формы (h, Ah)) является выполнение следующих (2^n-1) неравенств:*

$$a_{11} \ge 0, a_{22} \ge 0, \ldots, a_{nn} \ge 0;$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \ge 0, \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} \ge 0, \ldots, \begin{vmatrix} a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ a_{nn-1} & a_{nn} \end{vmatrix} \ge 0;$$

$$\ldots$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \ge 0.$$

Соответственно, необходимым и достаточным условием неположительной определенности *симметричной матрицы A (или квадратичной формы (h, Ah)) является выполнение (2^n-1) неравенств:*

$$a_{11} \le 0, a_{22} \le 0, \ldots, a_{nn} \le 0;$$

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \ge 0, \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} \ge 0, \ldots, \begin{vmatrix} a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ a_{nn-1} & a_{nn} \end{vmatrix} \ge 0;$$

$$\ldots$$

$$(-1)^n \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \ge 0.$$

Тождество... | элементарные кон-ции | $1^0=0$ | $0^0=1$

6 Математические основы многомерной оптимизации

Достаточные условие экстремума

Необходимое условие экстремума второго порядка. *Пусть функция $f(x): \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ дважды дифференцируема в точке $x^* \in \mathbb{R}^n$.*

Если x^* – точка безусловного локального минимума функции $f(x)$, то матрица Гессе:

$$H(x^*) = \left(\frac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{i,j=1,2,\ldots,n}$$

неотрицательно определенная.

Если x^* – точка безусловного локального максимума функции, то матрица Гессе – неположительно определенная.

Достаточное условие. *Пусть функция $f(x): \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ дважды дифференцируема в т. $x^* \in \mathbb{R}^n$. Для того, чтобы т. x^* являлась точкой безусловного локального минимума функции $f(x)$, достаточно выполнения условий:*

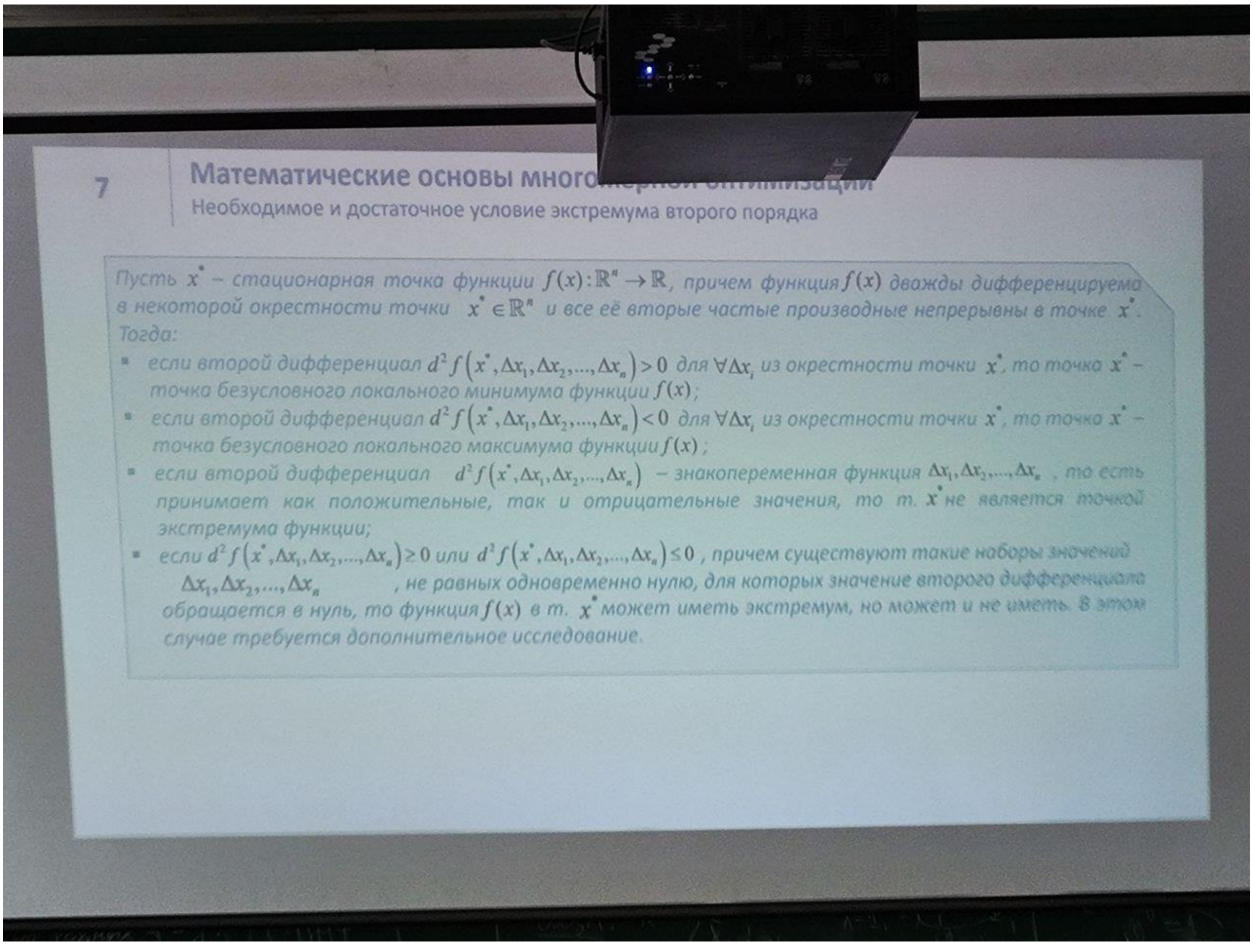
- $\nabla f(x^*) = 0$
- *матрица Гессе $H(x^*)$ положительно определенная.*

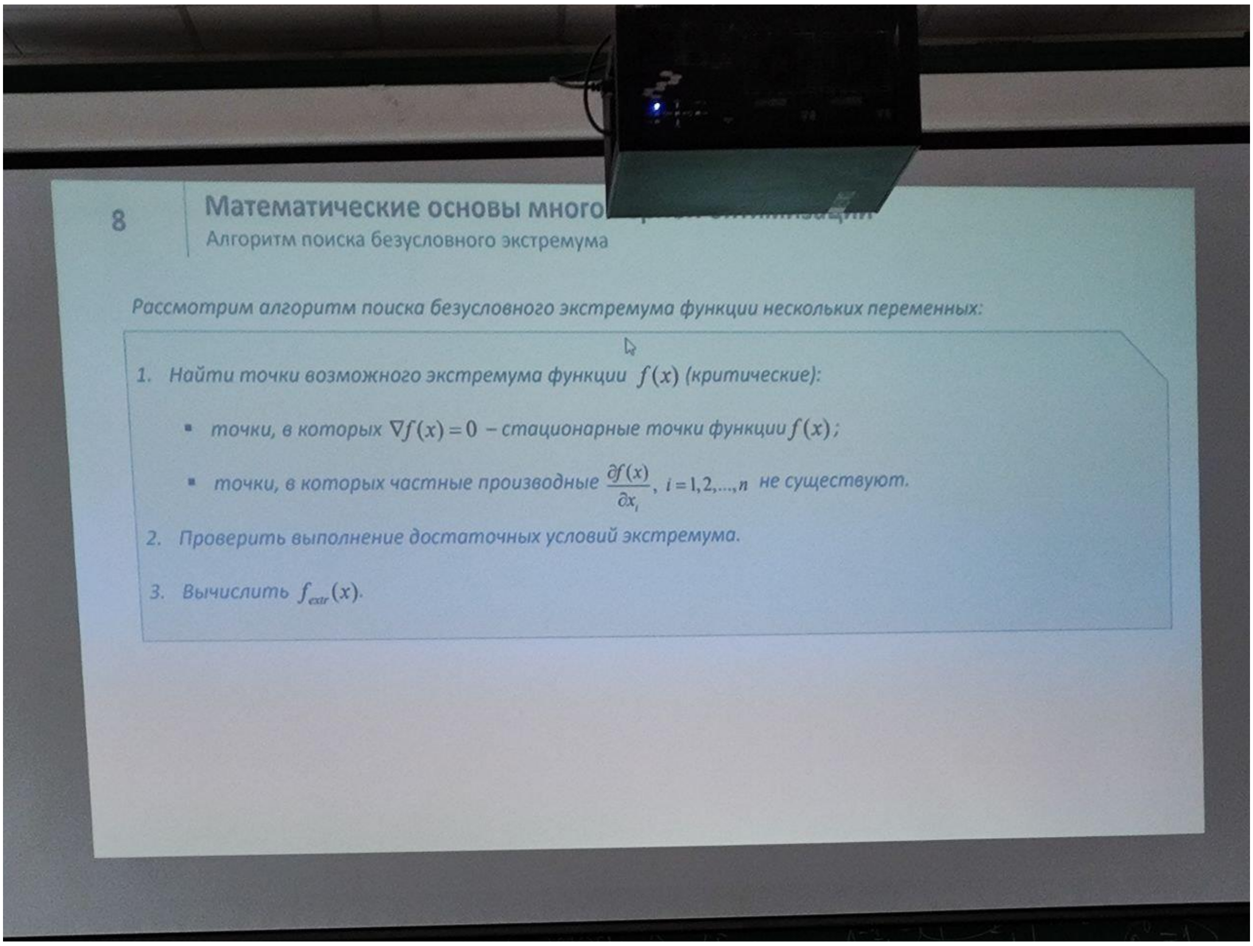
Для того, чтобы т. являлась точкой безусловного локального максимума функции, достаточно выполнения условий:

- $\nabla f(x^*) = 0$
- *матрица Гессе $H(x^*)$ отрицательно определенная.*

Тождество... | элементарные кон-ции | $1^0=0$ | $0^0=1$

$T. f \not\equiv 1 \Rightarrow f =$ СКНФ.


7
Математические основы много
Необходимое и достаточное условие экстремума второго порядка
Пусть x^* – стационарная точка функции $f(x):\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, причем функция $f(x)$ дважды дифференцируема в некоторой окрестности точки $x^* \in \mathbb{R}^n$ и все её вторые частные производные непрерывны в точке x^*. Тогда:
если второй дифференциал $d^2 f\left(x^*, \Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n\right) > 0$ для $\forall \Delta x_i$ из окрестности точки x^*, то точка x^* – точка безусловного локального минимума функции $f(x)$;
если второй дифференциал $d^2 f\left(x^*, \Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n\right) < 0$ для $\forall \Delta x_i$ из окрестности точки x^*, то точка x^* – точка безусловного локального максимума функции $f(x)$;
если второй дифференциал $d^2 f\left(x^*, \Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n\right)$ – знакопеременная функция $\Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n$, то есть принимает как положительные, так и отрицательные значения, то т. x^* не является точкой экстремума функции;
если $d^2 f\left(x^*, \Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n\right) \geq 0$ или $d^2 f\left(x^*, \Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n\right) \leq 0$, причем существуют такие наборы значений $\Delta x_1, \Delta x_2, ..., \Delta x_n$, не равных одновременно нулю, для которых значение второго дифференциала обращается в нуль, то функция $f(x)$ в т. x^* может иметь экстремум, но может и не иметь. В этом случае требуется дополнительное исследование.


8
Математические основы много
Алгоритм поиска безусловного экстремума
Рассмотрим алгоритм поиска безусловного экстремума функции нескольких переменных:
1. Найти точки возможного экстремума функции $f(x)$ (критические):
точки, в которых $\nabla f(x) = 0$ – стационарные точки функции $f(x)$;
точки, в которых частные производные $\frac{\partial f(x)}{\partial x_i}$, $i = 1, 2, ..., n$ не существуют.
2. Проверить выполнение достаточных условий экстремума.
3. Вычислить $f_{extr}(x)$.

9 **Алгоритм поиска безусловного [...]**

Пример

Задание: *исследовать на экстремум функцию* $f(x)=f(x_1,x_2)=x_1^2x_2^2+\frac{x_1^2}{2}+\frac{x_2^2}{2}+x_1x_2+1$.

Решение.

1) Определим градиент и матрицу Гессе функции $f(x)$:

$$\nabla f(x)=\nabla f(x_1,x_2)=\left(2x_1x_2^2+x_1+x_2,2x_1^2x_2+x_1+x_2\right)$$

$$H(x)=H(x_1,x_2)=\begin{pmatrix}2x_2^2+1 & 4x_1x_2+1\\ 4x_1x_2+1 & 2x_1^2+1\end{pmatrix}$$

Найдем стационарные точки функции , в которых может быть экстремум:

$$\nabla f(x^*)=0\Rightarrow\begin{cases}2x_1x_2^2+x_1+x_2=0\\ 2x_1^2x_2+x_1+x_2=0\end{cases}\Rightarrow x_1=x_2=0$$

Притом нет точек, в которых частные производные не существуют. Таким образом, функция имеет одну критическую точку $x^*=(0,0)$.

10 **Алгоритм поиска безусловного [...]**

Пример

Задание: *исследовать на экстремум функцию* $f(x)=f(x_1,x_2)=x_1^2x_2^2+\frac{x_1^2}{2}+\frac{x_2^2}{2}+x_1x_2+1$.

2) Матрица Гессе в критической точке $x^*=(0,0)$ *имеет вид:*

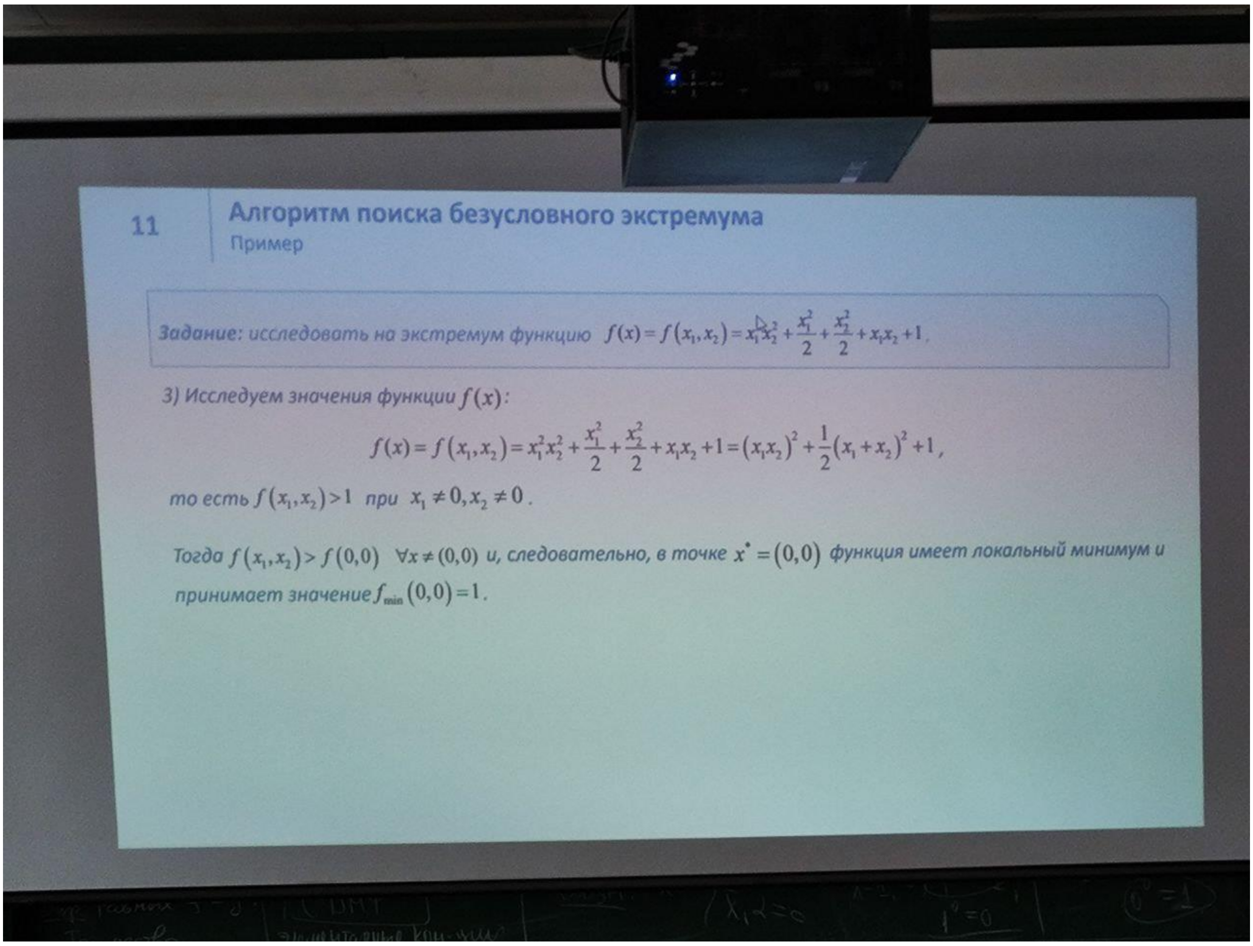
$$H(x^*)=H(0,0)=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

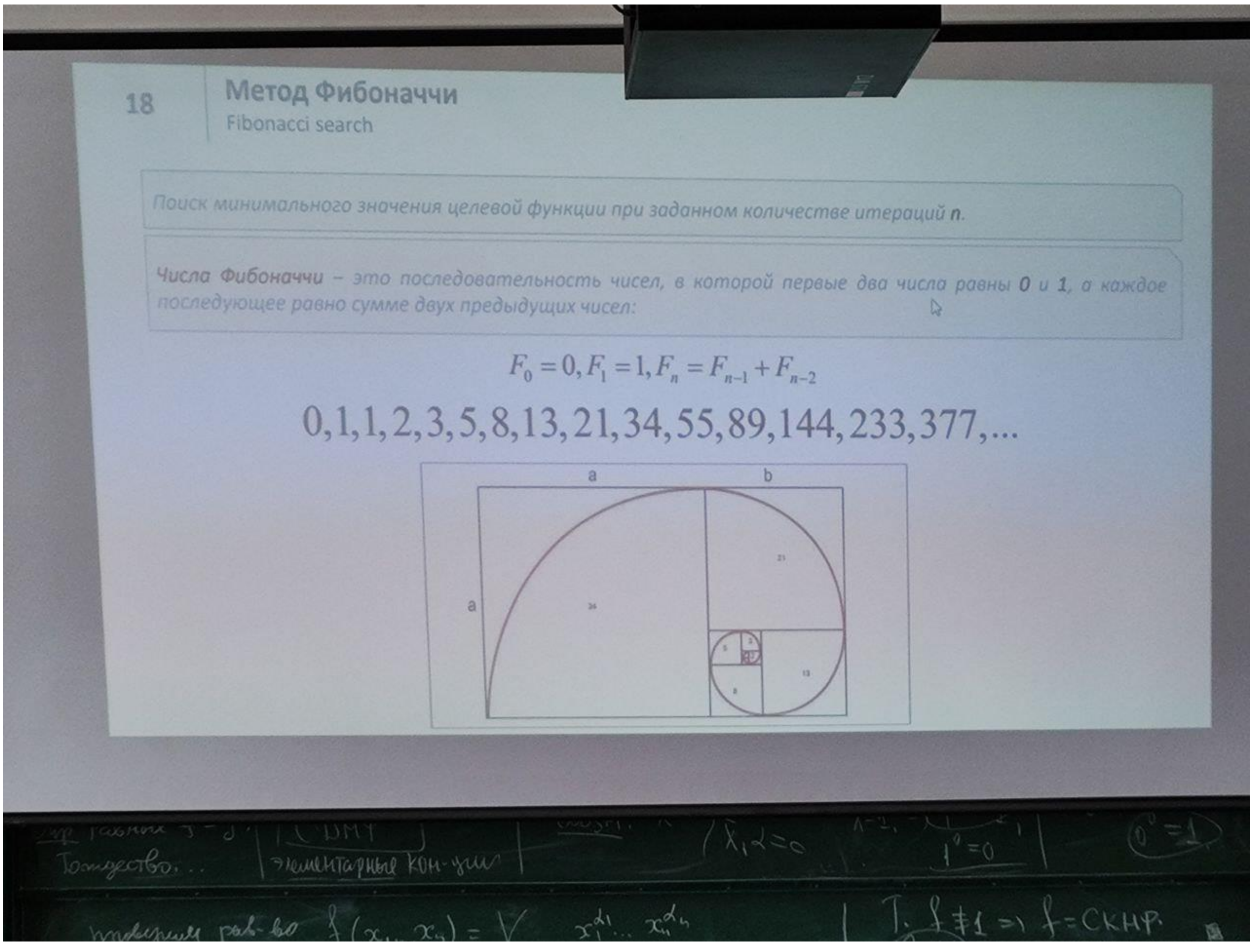
Определим главные миноры первого и второго порядка матрицы:

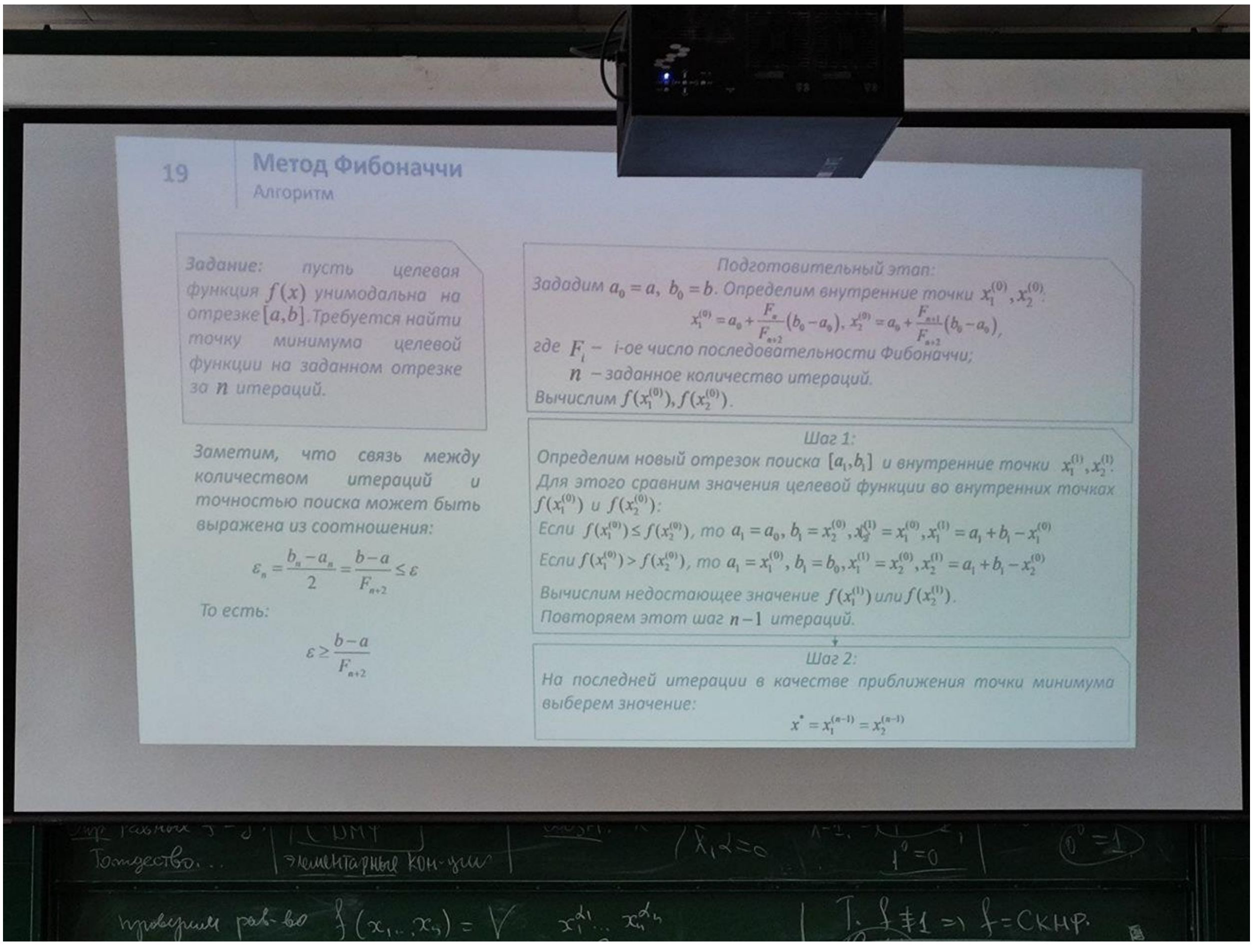
$$\det H_1(x^*)=1>0;$$

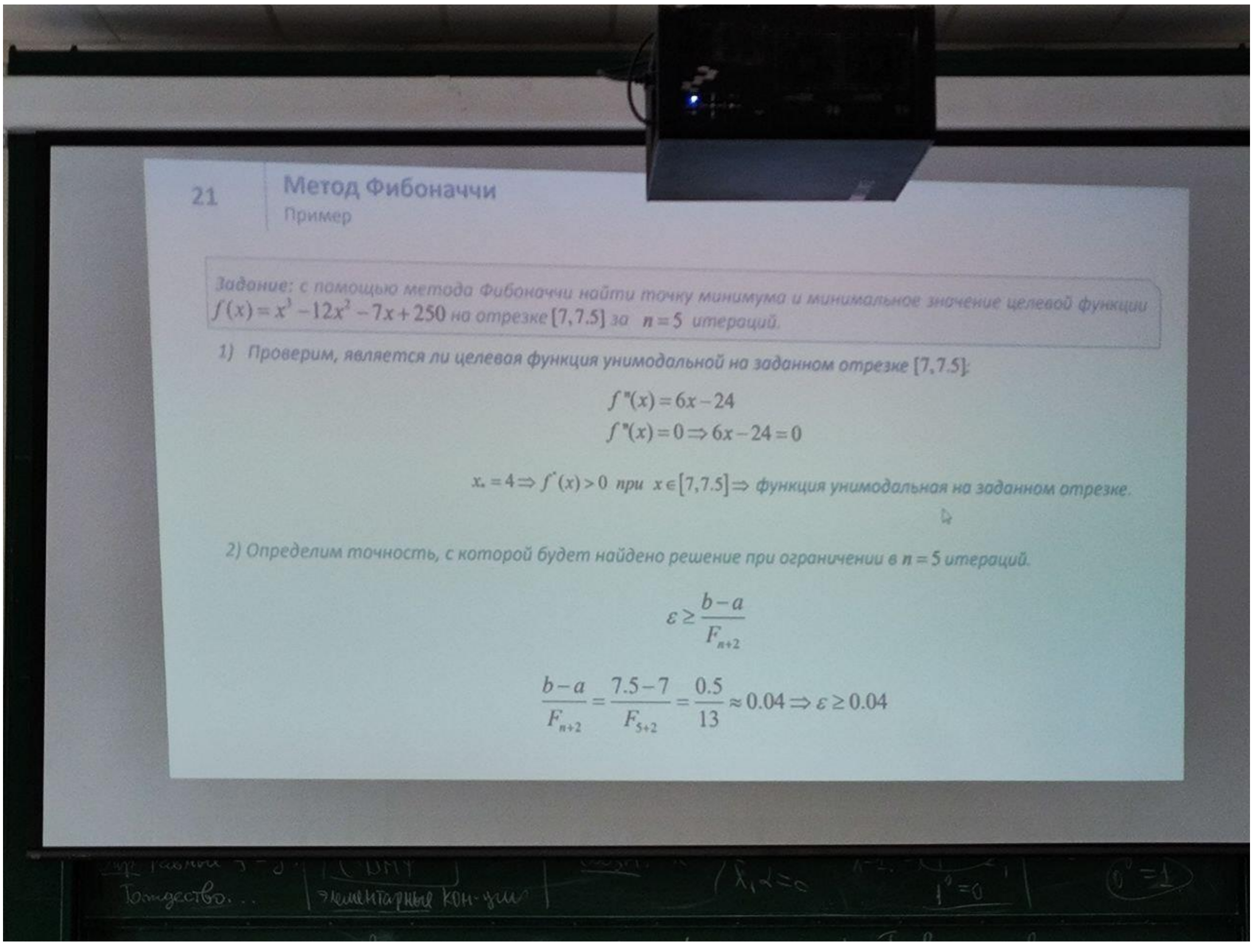
$$\det H_2(x^*)=\begin{vmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{vmatrix}=0$$

Следовательно, матрица неотрцательно определенная, требуется дополнительное исследование $f(x)$.


11
Алгоритм поиска безусловного экстремума
Пример
Задание: исследовать на экстремум функцию $f(x)=f(x_1,x_2)=x_1^2x_2^2+\frac{x_1^2}{2}+\frac{x_2^2}{2}+x_1x_2+1$.
3) Исследуем значения функции $f(x)$:
$f(x)=f(x_1,x_2)=x_1^2x_2^2+\frac{x_1^2}{2}+\frac{x_2^2}{2}+x_1x_2+1=(x_1x_2)^2+\frac{1}{2}(x_1+x_2)^2+1$,
то есть $f(x_1,x_2)>1$ при $x_1\neq 0, x_2\neq 0$.
Тогда $f(x_1,x_2)>f(0,0)$ $\forall x\neq(0,0)$ и, следовательно, в точке $x^*=(0,0)$ функция имеет локальный минимум и принимает значение $f_{\min}(0,0)=1$.


18
Метод Фибоначчи
Fibonacci search
Поиск минимального значения целевой функции при заданном количестве итераций n.
Числа Фибоначчи – это последовательность чисел, в которой первые два числа равны 0 и 1, а каждое последующее равно сумме двух предыдущих чисел:
$F_0=0, F_1=1, F_n=F_{n-1}+F_{n-2}$
$0,1,1,2,3,5,8,13,21,34,55,89,144,233,377,...$
a
b
a


19
Метод Фибоначчи
Алгоритм
Задание: пусть целевая функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[a,b]$. Требуется найти точку минимума целевой функции на заданном отрезке за n итераций.
Заметим, что связь между количеством итераций и точностью поиска может быть выражена из соотношения:
$\varepsilon_n = \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b-a}{F_{n+2}} \le \varepsilon$
То есть:
$\varepsilon \ge \frac{b-a}{F_{n+2}}$
Подготовительный этап:
Зададим $a_0 = a,\ b_0 = b$. Определим внутренние точки $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$:
$x_1^{(0)} = a_0 + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b_0 - a_0),\ x_2^{(0)} = a_0 + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0),$
где F_i – i-ое число последовательности Фибоначчи;
n – заданное количество итераций.
Вычислим $f(x_1^{(0)}), f(x_2^{(0)})$.
Шаг 1:
Определим новый отрезок поиска $[a_1, b_1]$ и внутренние точки $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}$.
Для этого сравним значения целевой функции во внутренних точках $f(x_1^{(0)})$ и $f(x_2^{(0)})$:
Если $f(x_1^{(0)}) \le f(x_2^{(0)})$, то $a_1 = a_0, b_1 = x_2^{(0)}, x_2^{(1)} = x_1^{(0)}, x_1^{(1)} = a_1 + b_1 - x_1^{(0)}$
Если $f(x_1^{(0)}) > f(x_2^{(0)})$, то $a_1 = x_1^{(0)}, b_1 = b_0, x_1^{(1)} = x_2^{(0)}, x_2^{(1)} = a_1 + b_1 - x_2^{(0)}$
Вычислим недостающее значение $f(x_1^{(1)})$ или $f(x_2^{(1)})$.
Повторяем этот шаг $n-1$ итераций.
Шаг 2:
На последней итерации в качестве приближения точки минимума выберем значение:
$x^* = x_1^{(n-1)} = x_2^{(n-1)}$


21
Метод Фибоначчи
Пример
Задание: с помощью метода Фибоначчи найти точку минимума и минимальное значение целевой функции $f(x) = x^3 - 12x^2 - 7x + 250$ на отрезке $[7, 7.5]$ за $n = 5$ итераций.
1) Проверим, является ли целевая функция унимодальной на заданном отрезке $[7, 7.5]$:
$f''(x) = 6x - 24$
$f''(x) = 0 \Rightarrow 6x - 24 = 0$
$x_* = 4 \Rightarrow f''(x) > 0$ при $x \in [7, 7.5] \Rightarrow$ функция унимодальная на заданном отрезке.
2) Определим точность, с которой будет найдено решение при ограничении в $n = 5$ итераций.
$\varepsilon \ge \frac{b-a}{F_{n+2}}$
$\frac{b-a}{F_{n+2}} = \frac{7.5-7}{F_{5+2}} = \frac{0.5}{13} \approx 0.04 \Rightarrow \varepsilon \ge 0.04$