# 3. ЛЕКЦИЯ. Методы нулевого порядка. Метод Хука-Дживса (метод конфигураций, метод пробных шагов).

Метод Хука – Дживъса относится, с одной стороны, к классу прямых методов оптимизации, а с другой стороны – к классу детерминированных методов оптимизации. Метод предназначен для решения многомерных задач локальной безусловной оптимизации.

В методе Хука-Дживса поиск минимума состоит из последовательности шагов исследующего поиска относительно базисной точки и поиска по образцу.

Рассмотрим для примера первую итерацию (последующие итерации выполняются по такой же схеме)

*Исследующий поиск* состоит в следующем. Задаются некоторой начальной (базисной) точкой $\overline{x^{(0)}}$ и величиной шага $h$ для каждого координатного направления ($i = \overline{1,n}$). Обследуют окрестность данной точки, изменяя по очереди компоненты вектора $\overline{x^{(0)}}$ вдоль каждого координатного направления. Для этого вычисляется значение целевой функции $f(\overline{x^{(0)}} + h_i\overline{e_i})$ в пробной точке $\overline{x^{(0)}} + h_i\overline{e_i}$, где $\overline{e_i}$ – единичный вектор в направлении оси $x_i$. Если значение целевой функции в пробной точке меньше значения целевой функции в базисной точке $\overline{x^{(0)}}$, то выбранный шаг $h_i$ считается удачным, и точка $\overline{x^{(0)}}$ заменяется на $\overline{x^{(0)}} + h_i\overline{e_i}$. В противном случае вычисляется величина $\overline{x^{(0)}} - h_i\overline{e_i}$, и если значение целевой функции уменьшается, то $\overline{x^{(0)}}$ заменяется на $\overline{x^{(0)}} - h_i\overline{e_i}$. После перебора всех координатных направлений ($i = \overline{1,n}$) исследующий поиск завершается. Полученную в результате точку $\overline{x^{(1)}}$ называют новым базисом. Если в точке нового базиса $\overline{x^{(1)}}$ уменьшение значения целевой функции не было достигнуто, то исследующий поиск повторяется вокруг той же базисной точки $\overline{x^{(0)}}$ но с меньшей величиной шага. Поиск завершается, когда все текущие величины шага будут меньше заданной точности. Если исследующий поиск был удачен, т.е.$f(\overline{x^{(1)}}) < f(\overline{x^{(0)}})$, то производится поиск по образцу.

*Поиск по образцу* производится из точки $\overline{x^{(1)}}$ в направлении вектора $(\overline{x^{(1)}} - \overline{x^{(0)}})$, поскольку это направление привило к уменьшению значения целевой функции. Координаты новой точки определяются в соответствии с формулой

$$\overline{x^{(2)}} = \overline{x^{(1)}} + \alpha(\overline{x^{(1)}} - \overline{x^{(0)}})$$

где $\alpha > 0$ – ускоряющий множитель

Если в результате получена точка с меньшим значением целевой функции, то она рассматривается как новая базисная точка. Если поиск по образцу был неудачен, то происходит возврат в новый базис $\overline{x^{(1)}}$, где продолжается исследующий поиск с целью выявления нового направления минимизации.

Изобразим схематично шаги метода Хука-Дживса для функций двух переменных (рис.1). Пунктирными линиями схематично отображаются шаги исследующего поиска вокруг базисной точки, сплошными – шаги удачного поиска

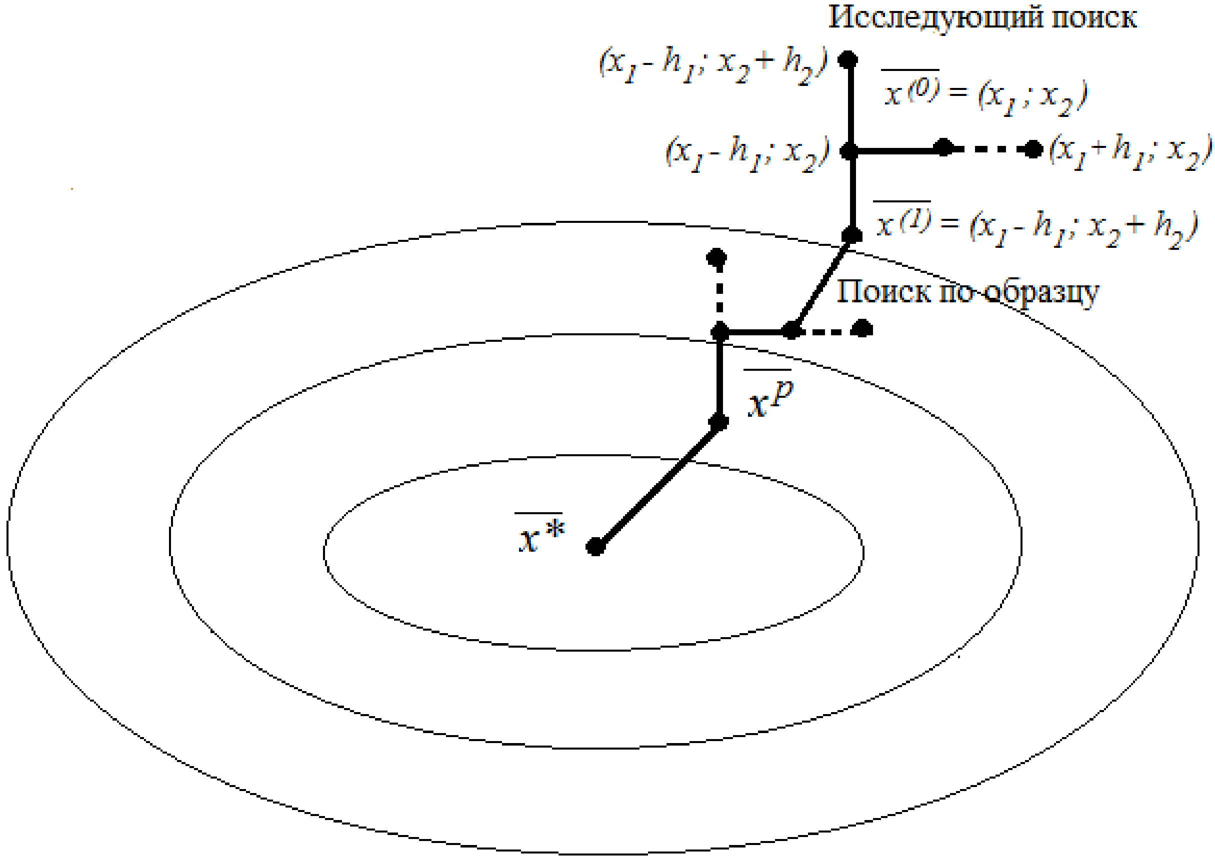


Рис.1. Графическая иллюстрация поиска точки минимума методом Хука-Дживса

**Алгоритм метода Хука-Дживса**

1. Задать размерность задачи оптимизации $n$, координаты начальной базисной точки $\overline{x^{(0)}} = \left\{ x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)} \right\}$, шаг $h$, для каждой переменной ($i = \overline{1,n}$), коэффициент уменьшения шага $d$ $(d > 1)$, ускоряющий множитель $m$ $(m > 0)$, точность поиска ε.

2. Ввести в рассмотрение текущую точку $\overline{x^{(1)}} = \left\{ x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)} \right\}$

3. Положить $\overline{x^{(1)}} = \overline{x^{(0)}}$. Вычислить значение функции $f(\overline{x^{(1)}})$ в точке $\overline{x^{(1)}}$.

4. Зафиксировать первое координатное направление $i = 1$.

5. Провести исследующий поиск вдоль оси $x_i$. Сделать шаг $h_i$ в положительном направлении координатной оси $\overline{x_\iota}^{(1)} = \overline{x_\iota}^{(1)} + h_i$ и вычислить значение функции $f(\overline{x^{(1)}})$ в полученной точке $\overline{x^{(1)}}$.

6. Если $f(\overline{x^{(1)}}) < f(\overline{x^{(0)}})$, то шаг в положительном направлении оси $x_i$ считается удачным, и осуществляется переход к пункту 8. В противном случае происходит возраст в исходную точку и делается шаг в отрицательном направлении координатной оси $\overline{x_\iota}^{(1)} = \overline{x_\iota}^{(1)} - 2h_i$.

7. Если $f(\overline{x^{(1)}}) < f(\overline{x^{(0)}})$, то шаг в положительном направлении оси $x_i$ считается удачным. Если условие не выполнено, то происходит возврат в исходную точку $\overline{x_\iota}^{(1)} = \overline{x_\iota}^{(1)} + h_i$. И в том и другом случае осуществляется переход к следующему пункту 8.

8. Проверить условие окончания исследующего поиска. Если $i < n$, то положить $i = i + 1$ и перейти к пункту 5 для продолжения исследующего поиска по оставшимся координатным направлениям. Если $i = n$ перейти к пункту 9.

9. Проверить успешность исследующего поиска. Если $\overline{x^{(1)}} = \overline{x^{(0)}}$, т.е. исследующий поиск был неудачным, то необходимо уменьшить величину шага $h_i = h_i/d$ $(i\ =\ \overline{1,n})$ и проверить поиск с пункта 4.

10. Если $\overline{x^{(1)}} \neq \overline{x^{(0)}}$, то проводится поиск по образцу

$$\overline{x^{(p)}} = \overline{x^{(1)}} + m\left(\overline{x^{(1)}} - \overline{x^{(0)}}\right)$$

и вычисляется значение функции в точке образца $f(\overline{x^{(p)}})$

11. Проверить удачность поиска по образцу. Если $f(\overline{x^{(p)}}) < f(\overline{x^{(1)}})$, то поиск по образцу удачен, и точка $\overline{x^{(0)}} = \overline{x^{(\mathrm{p})}}$ становится новой базисной точкой. В противном случае за базис применяется точка $\overline{x^{(0)}} = \overline{x^{(1)}}$.

12. Проверить условие окончания поиска. Если длины шагов $h_i \leq \varepsilon$ $(i\ =\ \overline{1,n})$, то поиск завершен $\overline{x^*} = \overline{x^{(1)}}$, $f_{min} = f(\overline{x^*})$. В противном случае осуществляется переход к пункту 3 и проводится исследующий поиск вокруг новой базисной точки $\overline{x^{(0)}}$.

***Пример:*** Найти минимум целевой функции.

$$f(\overline{x}\,) = x_1^2 - x_1x_2 + 3x_2^2 - x_1$$

методом Хука-Дживса с точностью ε = 0,1.

*Решение*. Зададим начальную (базисную) точку $\overline{x^{(0)}}\ = (x_1^{(0)}; x_2^{(0)}) = (0, 0)$, шаг по координатным направлениям $h = 0{,}2$ (принят постоянным), коэффициент уменьшения шага $d = 2$.

*Итерация 1.* Проверим исследующий поиск вокруг базисной точки $\overline{x^{(0)}}$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$. Фиксируя координату $x_2^{(0)}$ и делая шаг в положительном направлении координатной оси $x_1$, получим пробную точку $\left(\overline{x_1{}^{(0)}} + h,\ \overline{x_2{}^{(0)}}\right) = (0 + 0{,}2; 0) = (0{,}2; 0)$. Так как $f(0{,}2; 0) = -0{,}160 < f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$, то шаг в этом направлении считается удачным. Фиксируем пробную точку $x^{(1)} = (0{,}2; 0)$ и принимаем ее (табл.1).

*Таблица 1.*

| Точка | Координаты точки | | Значение функции |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | |
| $x^{(0)}$ | $x_1^{(0)} = 0$ | $x_2^{(0)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$ |
| $x^{(1)}$ | $x_1^{(1)} = 0{,}2$ | $x_2^{(1)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$ |

Далее делаем пробный шаг в направлении оси $x_2$, получим пробную точку $(0{,}2; 0 + h) = (0{,}2;\ 0{,}2)$. Так как $f(0{,}2;\ 0{,}2) = -0{,}080 > f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$, то шаг считается неудачным (рис.2). Возвращаемся на исходную точку и делаем шаг в отрицательном направлении оси $x_2$: $(0{,}2; 0 - h) = (0{,}2; -0{,}2)$. Так как $f(0{,}2;\ -0{,}2) = 0 > f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$, то шаг в этом направлении считается также неудачным (рис.2).

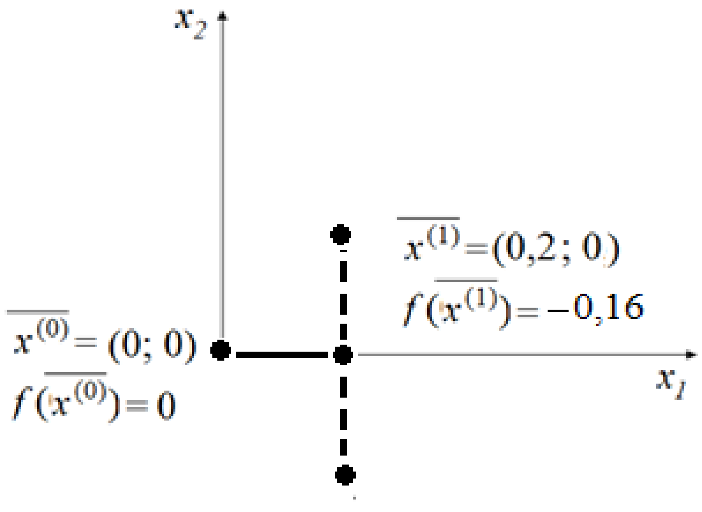


Рис.2. Итерация 1. Исследующий поиск.

Таким образом, рассмотрены все координатные направления и найдена новая базисная точка $\overline{x^{(1)}} = (0{,}2; 0)$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$. Учитывая, что исследующий поиск был удачен $x^{(0)} \neq x^{(1)}$, то произведем поиск по образцу

$$\overline{x^{(p)}} = \overline{x^{(1)}} + m\left(\overline{x^{(1)}} - \overline{x^{(0)}}\right) = (0{,}2; 0) + 0{,}5[(0{,}2; 0) - (0; 0)] = (0{,}3; 0)$$

Тогда $f\left(\overline{x^{(p)}}\right) = -0{,}210$

*Таблица 2.*

| Точка | Координаты точки | | Значение функции |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | |
| $x^{(0)}$ | $x_1^{(0)} = 0$ | $x_2^{(0)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$ |
| $x^{(1)}$ | $x_1^{(1)} = 0{,}2$ | $x_2^{(1)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$ |
| $x^{(2)}$ | $x_1^{(2)} = 0{,}3$ | $x_2^{(2)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(2)}}\right) = -0{,}21$ |

Так как $f\left(\overline{x^{(p)}}\right) < f\left(\overline{x^{(1)}}\right)$, то шаг по образцу считается удачным и точка $\overline{x^{(p)}} = \overline{x^{(2)}}$ становится новой базисной точкой (табл. 2).

*Итерация 2.* Проведем исследующий поиск вокруг базисной точки $\overline{x^{(2)}} = (0{,}3; 0)$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(2)}}\right) = -0{,}21$.

Из точки $\overline{x^{(2)}}$ сделаем шаг в положительном направлении оси $x_1$ и рассмотрим пробную точку $(0{,}3 + h; 0) = (0{,}3 + 0{,}2; 0) = (0{,}5; 0)$. Так как $f(0{,}5;\ 0) = -0{,}25 < f\left(\overline{x^{(2)}}\right) = -0{,}21$, то шаг в этом направлении удачный. Фиксируем пробную точку $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$ и принимаем ее в качестве временной базисной точки (табл.3), которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$.

*Таблица 3.*

| Точка | Координаты точки | | Значение функции |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | |
| $x^{(0)}$ | $x_1^{(0)} = 0$ | $x_2^{(0)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$ |
| $x^{(1)}$ | $x_1^{(1)} = 0{,}2$ | $x_2^{(1)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$ |
| $x^{(2)}$ | $x_1^{(2)} = 0{,}3$ | $x_2^{(2)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(2)}}\right) = -0{,}21$ |
| $x^{(3)}$ | $x_1^{(3)} = 0{,}5$ | $x_2^{(3)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}25$ |

Повторим те же действия для переменной $x_2$. Рассмотрим пробную точку $(0{,}5; 0 + h) = (0{,}5; 0 + 0{,}2) = (0{,}5; 0{,}2)$. Шаг в этом направлении неудачный, так как $f(0{,}5;\ 0{,}2) = -0{,}230 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$. Возвращаемся в исходную точку $(0{,}5; 0)$ и делаем шаг в отрицательном направлении оси $x_2$: $(0{,}5; 0 - h) = (0{,}5; 0 - 0{,}2) = (0{,}5; -0{,}2)$. Так как $(0{,}5;\ -0{,}2) = -0{,}030 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг также является неудачным.

Таким образом, рассмотрены все координатные направления и найдена новая базисная точка $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$ (рис. 3)

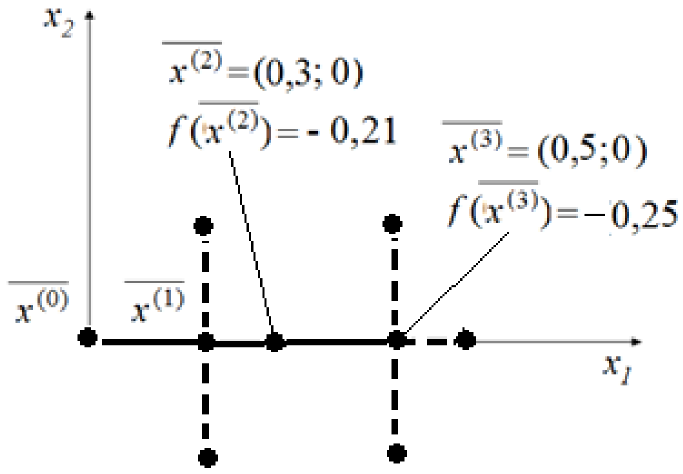


Рис.3. Итерация 2. Исследующий поиск и по образцу

Учитывая, что исследующий поиск был удачен $x^{(2)} \neq x^{(3)}$, то проводим поиск по образцу (рис.3)

$$\overline{x^{(p)}} = \overline{x^{(3)}} + m\left(\overline{x^{(3)}} - \overline{x^{(2)}}\right) = (0{,}5; 0) + 0{,}5[(0{,}5; 0) - (0{,}3; 0)] = (0{,}6; 0)$$

Тогда $f\left(\overline{x^{(p)}}\right) = -0{,}240$

Так как $f\left(\overline{x^{(p)}}\right) = -0{,}240 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг по образцу считается неудачным и дальнейшее исследование проводится относительно точки $\overline{x^{(3)}}$.

*Итерация 3*. Проведем исследующий поиск вокруг базисной точки $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}25$.

Из точки $\overline{x^{(3)}}$ сделаем шаг в положительном направлении оси $x_1$ и рассмотрим пробную точку $(0{,}5 + h; 0) = (0{,}5 + 0{,}2; 0) = (0{,}7; 0)$. Так как $f(0{,}7;\ 0) = -0{,}210 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг в данном направлении неудачный (рис.4).

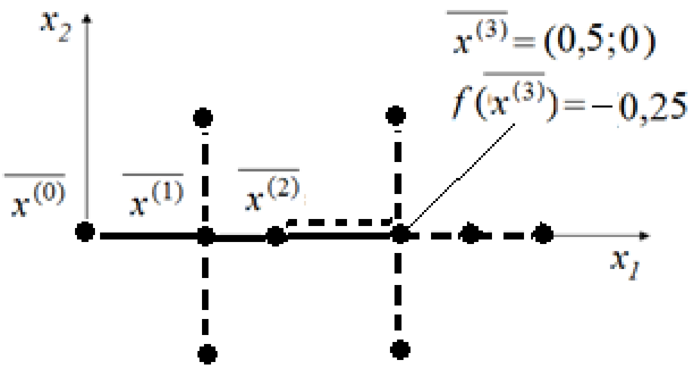


Рис.4. Итерация 3. Исследующий поиск

Возвращаемся в исходную точку $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$ и делаем шаг в отрицательном направлении по оси $x_1$: $(0{,}5 - h; 0) = (0{,}5 - 0{,}2; 0) = (0{,}3; 0)$. Так как $(0{,}3; 0) = \overline{x^{(2)}}$, то шаг соответственно является неудачным. Возвращаемся в исходную точку.

Таким образом, исследующий поиск с величиной шага, равной $h = 0{,}2$, был неудачен. Тогда уменьшим величину шага на $d = 2$. Получим $h = {}^{h}/_{d} = 0{,}1$.

Возобновим исследующий поиск относительно точки $\overline{x^{(3)}}$.

*Итерация 4*. Проведем исследующий поиск с уменьшенной величиной шага относительно базисной точки $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}25$.

Из точки $\overline{x^{(3)}}$ сделаем шаг в положительном направлении оси $x_1$ и рассмотрим пробную точку $(0{,}5 + h; 0) = (0{,}5 + 0{,}1; 0) = (0{,}6; 0)$. Так как $f(0{,}6;\ 0) = -0{,}240 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг в данном направлении является неудачным. Возвращаемся в исходную точку $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$ и делаем шаг в отрицательном направлении по оси $x_1$: $(0{,}5 - h; 0) = (0{,}5 - 0{,}1; 0) = (0{,}4; 0)$. Так как $f(0{,}4;\ 0) = -0{,}240 > f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг в данном направлении также является неудачным. Снова возвращаемся в исходную точку $\overline{x^{(3)}} = (0{,}5; 0)$. Таким образом, поиск вдоль оси $x_1$ не дал результатов.

Повторим те же действия с переменной $x_2$. Рассмотрим пробную точку $(0{,}5; 0 + h) = (0{,}5; 0 + 0{,}1) = (0{,}5; 0{,}1)$. Так как $f(0{,}5;\ 0{,}1) = -0{,}270 < f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}250$, то шаг в данном направлении удачный.

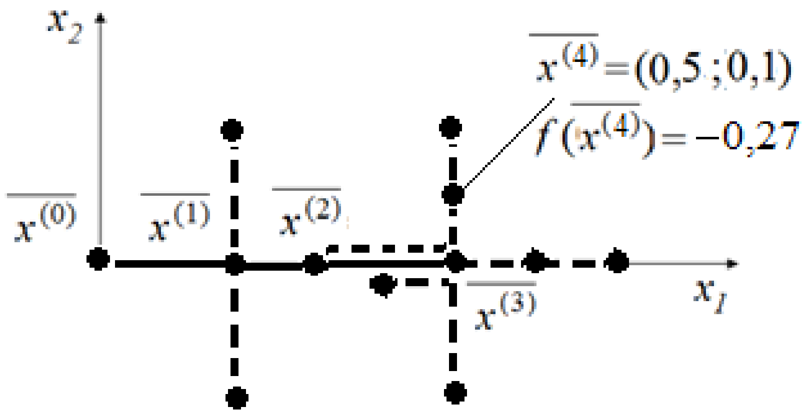


Рис.5. Итерация 4. Исследующий поиск

Фиксируем пробную точку $\overline{x^{(4)}} = (0{,}5; 0{,}1)$ и принимаем ее в качестве временной базисной точки, которой соответствует значение целевой функции $f\left(\overline{x^{(4)}}\right) = -0{,}270$ (табл. 4)

*Таблица 4.*

| Точка | Координаты точки | | Значение функции |
|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | |
| $x^{(0)}$ | $x_1^{(0)} = 0$ | $x_2^{(0)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(0)}}\right) = 0$ |
| $x^{(1)}$ | $x_1^{(1)} = 0{,}2$ | $x_2^{(1)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(1)}}\right) = -0{,}16$ |
| $x^{(2)}$ | $x_1^{(2)} = 0{,}3$ | $x_2^{(2)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(2)}}\right) = -0{,}21$ |
| $x^{(3)}$ | $x_1^{(3)} = 0{,}5$ | $x_2^{(3)} = 0$ | $f\left(\overline{x^{(3)}}\right) = -0{,}25$ |
| $x^{(4)}$ | $x_1^{(4)} = 0{,}5$ | $x_2^{(4)} = 0{,}1$ | $f\left(\overline{x^{(4)}}\right) = -0{,}27$ |

Проверяем условие окончания поиска $h = 0{,}1 \leq \varepsilon$, то поиск завершен и требуема точность достигнута $\overline{x^*} = \overline{x^{(4)}} = (0{,}5; 0{,}1)$, $f(\overline{x^*}) = -0{,}27$

Метод Хука-Дживса так же, как и алгоритмы Нелдера-Мида и симплексного метода, служит для поиска безусловного локального экстремума функции и относится к прямым методам, то есть опирается непосредственно на значения функции.

Метод Хука-Дживса имеет высокую эффективность в случае, если функция $f(\bar{x})$, имеет прямолинейный овраг (котловинный). При минимизации "овражных" функций, имеющих не прямолинейный овраг, процесс поиска может сильно замедлиться и закончиться далеко от точки истинного минимума.

**Рельеф функции**

Понятие «рельеф функции» удобно рассмотреть на примере функции двух переменных $z = F(x, y)$. Эта функция описывает некоторую поверхность в трехмерном пространстве с координатами x, y, z. Задача $F(x, y) \rightarrow min$ означает поиск низшей точки этой поверхности.

Как в топографии, изобразим рельеф этой поверхности линиями уровня. Проведем равноотстоящие плоскости $z = const$ и найдем линии их пересечения с поверхностью $F(x, y)$.

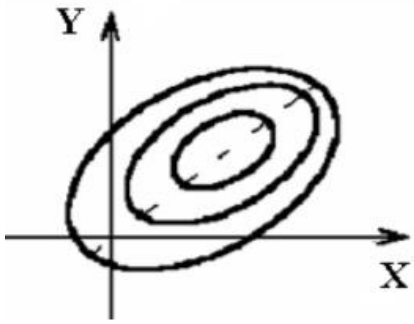


Рис. 6. Котловинный рельеф

Из рис.6. видно почему **котловинный рельеф** иногда называют прямолинейный овраг (линия направления функции прямая - штриховая). При котловинном рельефе линии уровня похожи на эллипсы.

По виду линий уровня условно можно выделить также два типа рельефа: овражный (рис.7-8) и неупорядоченный (рис.9).

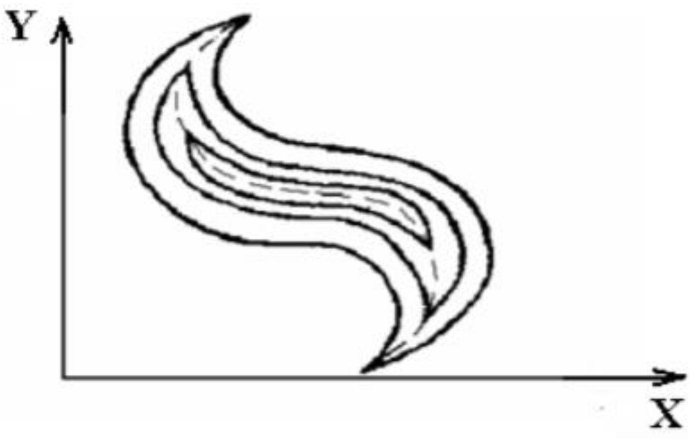


Рис. 7. Овражный рельеф

Рассмотрим **овражный тип рельефа**. Если линии уровня кусочно-гладкие (рис. 7), то выделим на каждой из них точку излома. Геометрическое место точек излома назовем ***истинным оврагом***, если угол направлен в сторону возрастания функции, и ***гребнем***, – если в сторону убывания.

Чаще линии уровня всюду гладкие, но на них имеются участки с большой кривизной. Геометрические места точек с наибольшей кривизной назовем ***разрешимым оврагом*** или ***гребнем*** (рис. 8).

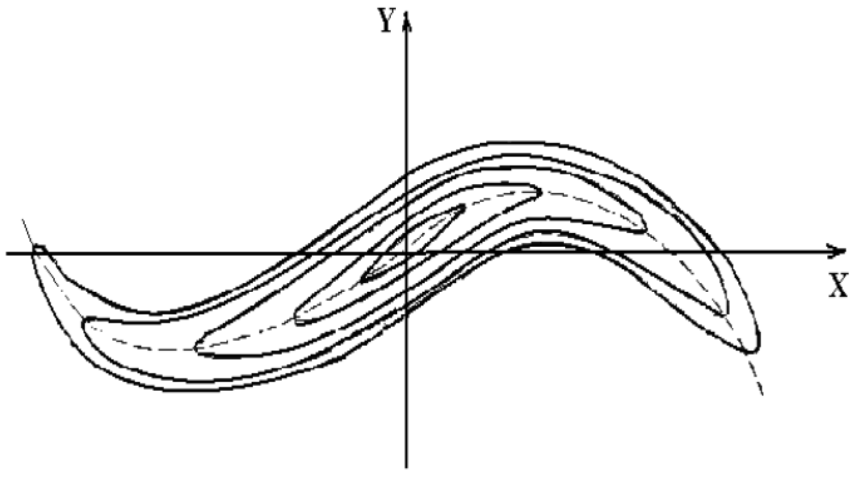


Рис. 8. Разрешимый овраг

Например, рельеф функции $F(x,y) = 10(y - \sin x)^2 + 0{,}1x^2$ (рис. 8) имеет ярко выраженный извилистый разрешимый овраг, «дно» которого – синусоида, а низшая точка – начало координат.

**Неупорядоченный тип рельефа** характеризуется наличием многих максимумов и минимумов. Так, функция $F(x, y) = (1 + sin^2 x)(1 + sin^2 y)$ (рис.9) имеет минимумы в точках $x_k^* = \pi k,\ y_l^* = \pi l$ и максимумы в точках, сдвинутых относительно минимумов на $\pi/_2$ по каждой координате (рис.9).

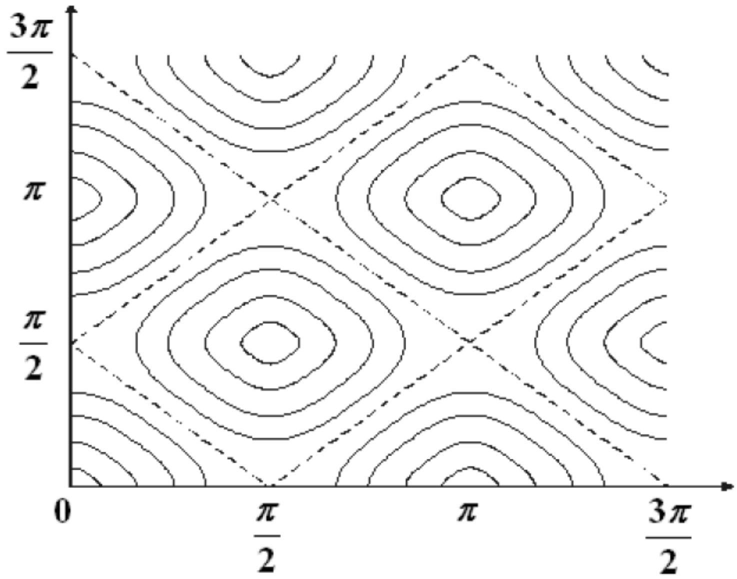


Рис. 9. Неупорядоченный тип

Все эффективные методы поиска минимума сводятся к построению траекторий, вдоль которых функция убывает; разные методы отличаются способами построения таких траекторий. Метод, приспособленный к одному типу рельефа, может оказаться плохим на рельефе другого типа.