

Содержание

1. Симплекс метод	3
2. Условная нелинейная минимизация	6
3. Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла	6
3.1. О методе	6
3.2. Метод золотого сечения	7
3.3. Работа программы на тестовых функциях	8
3.4. Исследование заданной функции	11
4. Штрафные функции	14

1. Симплекс метод

Описание метода

Пусть дана линейная функция $f(x) = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$ с линейными ограничениями вида $g^i = b_1^ix_1 + b_2^ix_2 + \dots + b_n^ix_n \leq 0$, где $x_i > 0$ и $i = 1..k$, требуется минимизировать эту функцию. Для решения этой задачи можно просто перебрать все вершины получающегося n -мерного многогранника, но для больших размеров систем это слишком трудоемкая задача, так как количество всех вершин равно числу сочетаний $C_n + k^k$ [1], но там не все вершины являются допустимыми, т.е. не все удовлетворяют ограничениям g^i . Для того чтобы не перебирать все вершины, двигаются от вершины к вершине в направлении уменьшения функции, на этом основан симплекс метод.

Ограничения вида неравенств $g \leq 0$ и $\hat{g} \geq 0$ сводятся к ограничениям типа равенств добавлением искусственных переменных $g + s_i = 0$ и $\hat{g} - s_i = 0$, где $s_i \geq 0$. А если нету ограничений на переменные x_i , т.е. $x_i \in (-\infty, \infty)$, то их разбивают на две положительные переменные $x^i = p_i - n_i$, $p_i \geq 0$, $n_i \geq 0$. Если надо функцию $f(x)$ максимизировать, то можно минимизировать функцию $-f(x)$. Таким образом все задачи линейного программирования сводятся к виду

$$\begin{cases} f(x) \rightarrow \min; \\ g^j = 0, & j = 1..k; \\ x_i \geq 0, & i = 1..n. \end{cases}$$

Алгоритм симплекс метода имеет наглядную геометрическую интерпретацию. Все переменные делят на два типа: базисные и небазисные. Небазисные переменные приравниваются к нулю. Что бы определить на рисунке вершину в кооторой мы находимся, надо пересеч прямые перпендикулярные небазисным переменным, они являются нулевым уровнем и одновременно гранью многогранника, если это действительно вершина, а не просто пересечение линий, т.е. если решение является допустимым и удовлетворяет ограничениям g_i . Симплексное отношение — это координата которая отсекается вводимой переменной от исключаемой.

Алгоритм симплекс метода при минимизации:

- 0 Предполагается что мы находимся в вершине, т.е. решение базисное и удовлетворяет ограничениям.
- 1) Определяется вводимая переменная по наибольшему положительному коэффициенту в целевой функции $f(x)$ в симплекс таблице.
- 2) Определяется исключаемая переменная по наименьшему симплексному соотношению

- #### 4) Переход на первый шаг

$$\begin{aligned} & \sim \left(\begin{array}{c|ccccc|c} 0 & 15 & 2 & -3 & -7 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 2 & 7 \\ 5 & 0 & -2 & -2 & 17 & -1 & -4 \end{array} \right) \begin{array}{c} \leftarrow + \\ \leftarrow -2 \\ \leftarrow + \end{array} \\ & \sim \left(\begin{array}{c|ccccc|c} 0 & 15 & 0 & -7 & -5 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 2 & 7 \\ 5 & 0 & 0 & 2 & 15 & -1 & 4 \end{array} \right) \begin{array}{c} \leftarrow + \\ \leftarrow -7 \\ \leftarrow -2 \\ \leftarrow -2 \\ \leftarrow + \end{array} \\ & \sim \left(\begin{array}{c|ccccc|c} 0 & 15 & 0 & 0 & 30 & 15 & 45 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -11 & -4 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 2 & 7 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 5 & -5 & -10 \end{array} \right) \begin{array}{c} | : 15 \\ | : 5 \end{array} \\ & \sim \left(\begin{array}{c|ccccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -11 & -4 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 2 & 7 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \end{array} \right). \end{aligned}$$

Получили базисное решение. Будет ли оно допустимым? Нет, т. к. приравняв к нулю свободные переменные x_4 и x_5 , получим решение $x = (3, -10, 7, 0, 0)$, в котором координаты не являются положительными. Исключим отрицательную переменную x_2 из базиса. Вводимой переменной выберем ту, которая имеет наибольший коэффициент при целевой функции, т. е. ведущим элементом будет -11 .

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -11 & -4 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 & 2 & 7 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{array}{l} 11 \xleftarrow{+} \\ \text{---} \xleftarrow{2} \text{---} \xleftarrow{5} \\ 11 \xleftarrow{+} \\ 11 \xleftarrow{+} \end{array} \Bigg]_+^1 \quad \sim$$

Так как все коэффициенты, не считая боковые, в последней строке отрицательны, то мы достигли минимума. Приравняв свободные переменные x_2 и x_5 , получим решение $x = (1, 0, 2, 1, 0)$.

Проверка:

$$f = -3 \cdot 1 + 1 \cdot 2 - 2 \cdot 1 = -3,$$

в тоже время

$$11 \cdot f = 15 \cdot x_5 - 33 \implies f = -3.$$

Сходится, значит матричные вычисления верны.

2. Условная нелинейная минимизация

Требуется минимизировать функцию с ограничениями

$$\begin{aligned} f(x) &= x_1^2 + x_2^2 \rightarrow \min, \\ \begin{cases} x_1^2 + 2(x_2 - 2) \leq 8, \\ x_1^2 + (x_2 - 2)^2 \geq 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Функция $f(x)$ является параболой дом вращения, значит она выпукла. Применяя теорему Куна-Такера, составим функцию лагранжа и условия дополняющей нежесткости.

$$\begin{aligned} L &= \lambda_0(x_1^2 + x_2^2) + \mu_1(x_1^2 + 2(x_2 - 2) - 8) + \mu_2(1 - x_1^2 - (x_2 - 2)^2) \\ \mu_1(x_1^2 + 2(x_2 - 2) - 8) &= 0 \\ \mu_2(1 - x_1^2 - (x_2 - 2)^2) &= 0 \end{aligned}$$

Продифференцировав L , получим систему уравнений

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2\lambda_0 x_1 + 2\mu_1 x_1 - 2\mu_2 x_1 = 0 \quad (1a)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = 2\lambda_0 x_2 + 2\mu_1 x_2 - 2\mu_2 x_2 = 0 \quad (1b)$$

$$\mu_1(x_1^2 + 2(x_2 - 2) - 8) = 0 \quad (1c)$$

$$\mu_2(1 - x_1^2 - (x_2 - 2)^2) = 0 \quad (1d)$$

Рассмотрим случай когда x^* не находится на границе, т.е. $x_1^2 + 2(x_2 - 2) - 8 \neq 0$ и $1 - x_1^2 - (x_2 - 2)^2 \neq 0$, тогда из уравнений (1c) и (1d) получим, что $\mu_1 = 0$ и $\mu_2 = 0$. В силу не тривиальности функции Лагранжа $\lambda_0 \neq 0$, тогда из (1a) и (1b) следует, что $x_1 = 0$ и $x_2 = 0$ является локальным минимумом. В силу выпуклости целевой функции он будет глобальным.

3. Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла

3.1. О методе

Многие численные методы многомерной минимизации, использующие градиент, последовательно приближаются к минимуму по такой схеме

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \gamma_k M(f, x_k) f'(x^{(k)}),$$

где $f(x)$ — целевая функция, минимум которой мы ищем, а $f'(x)$ — ее градиент. К примеру в методе наискорейшего спуска матрицу M заменяют на единичную матрицу E , а в методе Ньютона M равна обратной матрице Гессе H^{-1} .

Матрицу M в методе Давидона-Флетчера-Пауэлла

$$D_{k+1} = D_k + A_k + B_k,$$

которые определяются из следующих соотношений

$$A_k = \frac{u_k u_k^T}{u_k^T v_k},$$

$$B_k = -\frac{D_k v_k v_k^T D_k}{u_k^T v_k},$$

где

$$u_k = x_{k+1} - x_k,$$

$$v_k = f'(x_{k+1}) - f'(x_k).$$

Причем $D_0 = E$, а предел последовательности матриц

$$\lim_{k \rightarrow \infty} D_k = H^{-1}$$

сходится к матрице Гессе, т.е. в начале алгоритм работает как метод наискорейшего спуска, а в при большом k как метод Ньютона.

3.2. Метод золотого сечения

Одним из самых эффективных методов одномерной минимизации на унимодальных функциях является метод золотого сечения. Для того чтобы найти следующий подотрезок в котором находится минимум, вычисляется значение функции всего в одной точке. Опишем подробнее процесс нахождения минимума.

Пусть функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[A, D]$. Вычислим значения функции в точках B и C . В силу унимодальности, если $f(B) < f(C)$, то минимум находится в отрезке $[A, C]$, если $f(B) > f(C)$, то в $[B, D]$. Из исходного отрезка мы получили подотрезок меньшей длины, повторяя эту процедуру для полученного подотрезка рекурсивно, можно найти минимум с заданой точностью.

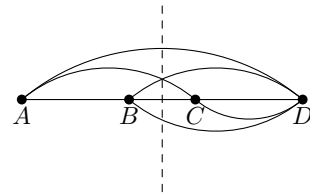


Рис. 1. Разбиение на отрезки методом золотого сечения

Точки B и C выбираются симметрично относительно центра так, чтобы выполнялись соотношения

$$\frac{AD}{AC} = \varphi, \quad \frac{AD}{BD} = \varphi,$$

где φ золотое сечение

$$\varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = \frac{1}{-1 + \frac{1}{-1 + \frac{1}{\dots}}}. \quad (*)$$

Покажем, что значение функции на каждом шаге кроме первого надо вычислять всего лишь одной точке. Для этого достаточно доказать, что BD и CD в золотой пропорции.

$$\frac{BD}{CD} = \frac{l}{\varphi} : \left(l - \frac{l}{\varphi} \right) = \frac{1}{\varphi - 1}$$

Но из цепной дроби $(*)$ видно, что $\frac{1}{\varphi - 1} = \varphi$.

3.3. Работа программы на тестовых функциях

- 1) Функция Розенброка, $f(x_1, x_2) = (x_1 - x_2^2)^2 + (x_1 - 1)^2$ имеет минимум в $x^* = (1, 1)$, начальная точка $x^{(0)} = (-1.2, 1)$
- 2) Функция Розенброка, $x^{(0)} = (-2, 10)$
- 3) Функция Химмельблау, $f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$ имеет 4 глобальных минимума, где $f(x^*) = 0$:
 к $x_{(1)}^* = (3.000000, 2.000000)$ сходится из $x_{(1)}^{(0)} = (-0.4, 1.0)$,
 к $x_{(2)}^* = (-2.805118, 3.131312)$ сходится из $x_{(2)}^{(0)} = (-0.2, 1.0)$,
 к $x_{(3)}^* = (-3.779310, -3.283186)$ сходится из $x_{(3)}^{(0)} = (-0.2, 0.8)$,
 к $x_{(4)}^* = (3.584428, -1.848126)$ сходится из $x_{(4)}^{(0)} = (-0.4, 0.8)$.
 И есть один локальный максимум в $\hat{x} = (-0.270844, -0.923038)$,
 $f(\hat{x}) = 181.616$
- 4) Тест на одномерную минимизацию, функция имеющая большой овраг в форме $x_2 = 2 * x_1^3 - 2 * x_1$ и точку минимума $x^* = (0, 0)$, $x^{(0)} = (-1.2, 1)$

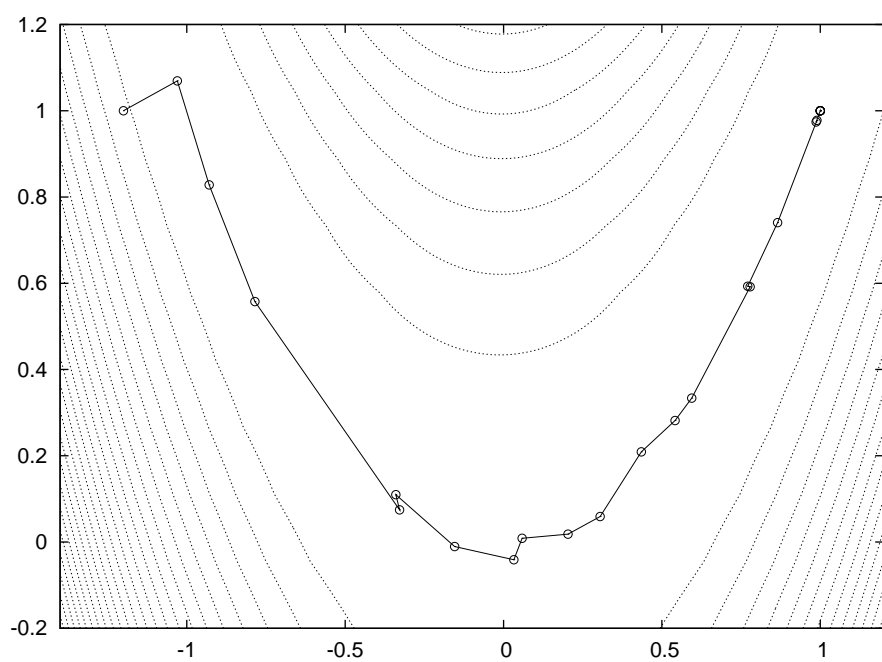


Рис. 2. Функция Розенброка

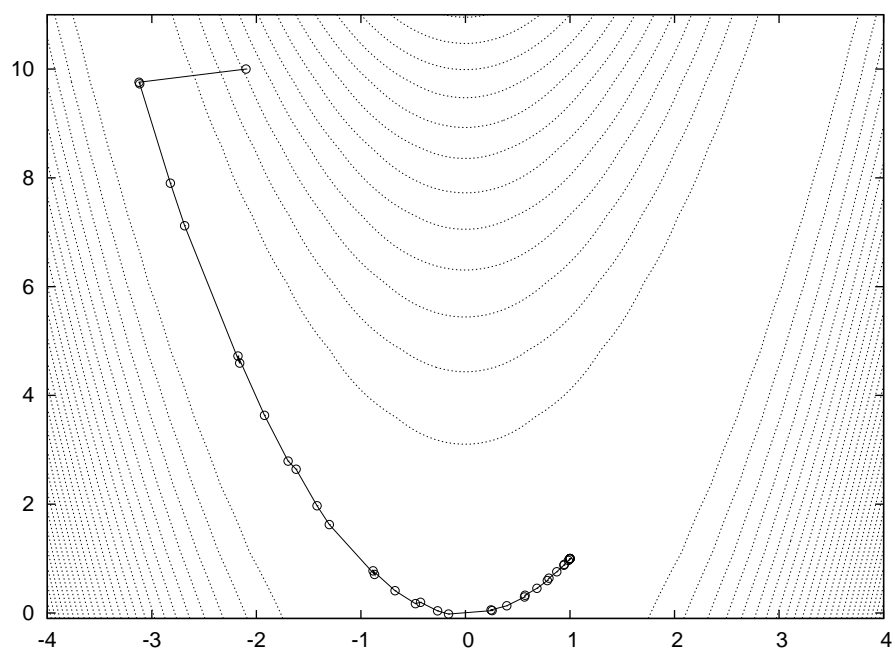


Рис. 3. Функция Розенброка

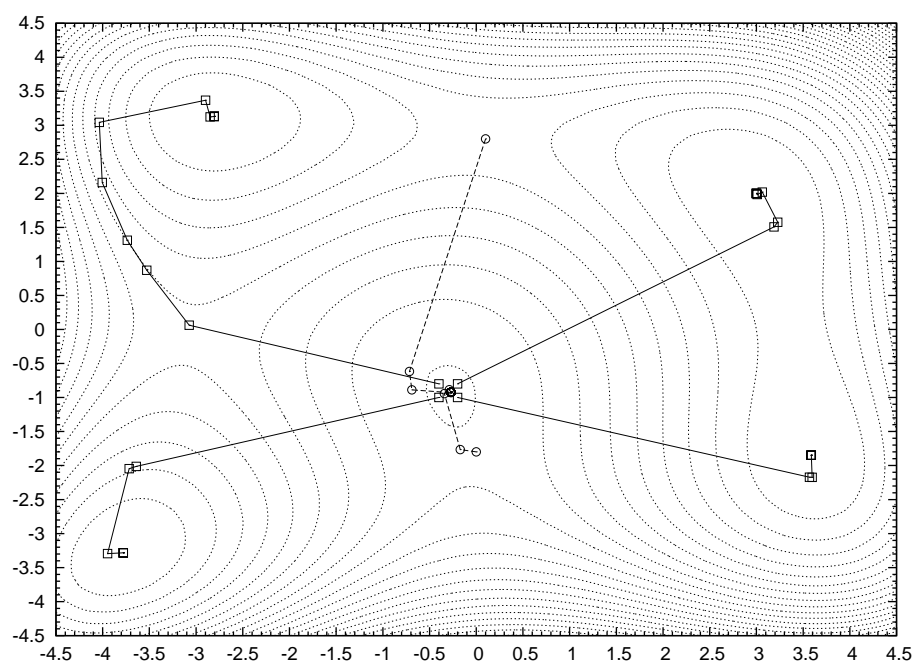


Рис. 4. Функция Химмельблау

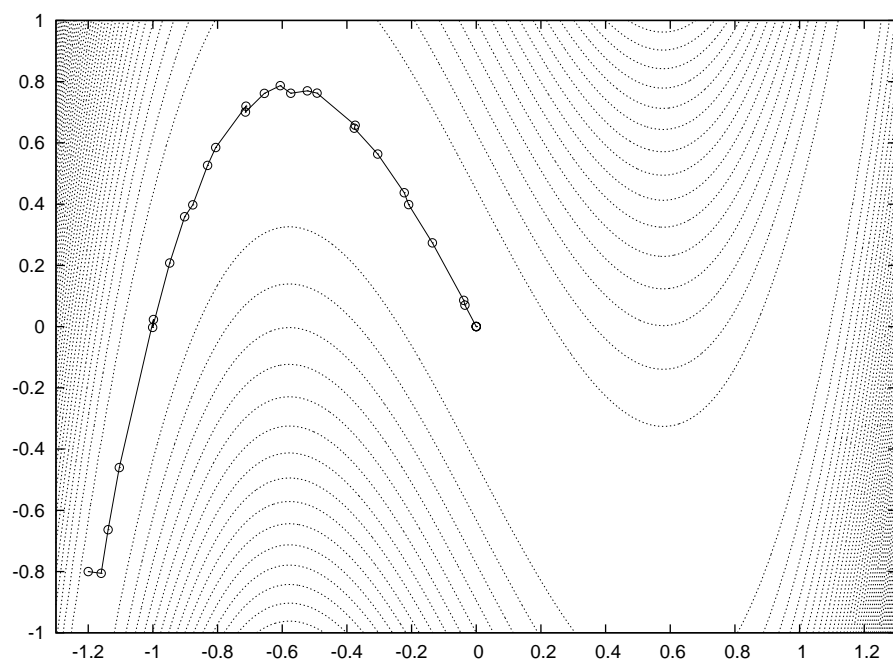


Рис. 5. Тест на одномерную минимизацию

3.4. Исследование заданной функции

Требуется исследовать заданную функцию на минимум

$$f(x_1, x_2) = \sqrt{1 + 2x_1 + x_2^2} + e^{x_1^2 + 2x_2^2} - x_1 - x_2 \quad (2)$$

Так как корня из отрицательного числа не существует, то область определения функции определяется из неравенства $1 + 2x_1 + x_2^2 \geq 0$, а границей области определения является парабола $x_1 = -\frac{1}{2} - \frac{x_2^2}{2}$. Исследуем функцию на выпуклость из условия положительной определенности матрицы Гессе.

$$H = \begin{pmatrix} f''_{x_1x_1} & f''_{x_1x_2} \\ f''_{x_2x_1} & f''_{x_2x_2} \end{pmatrix} \succ 0$$

Для этого все угловые миноры должны быть положительны, т.е. $h_{11} > 0$ и $h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21} > 0$. Найдем частные производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_1} &= x_1(1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{1}{2}} + e^{x_1^2 + 2x_2^2} - 1, \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} &= x_2(1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{1}{2}} + 4x_2e^{x_1^2 + 2x_2^2} - 1, \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} &= -(1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{3}{2}} + (4x_1^2 + 2)e^{x_1^2 + 2x_2^2}, \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} &= (1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{1}{2}} - x_2^2(1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{3}{2}} + (16x_2^2 + 4)e^{x_1^2 + 2x_2^2}, \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} &= \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} = -x_2(1 + 2x_1 + x_2^2)^{-\frac{3}{2}} + 8x_1x_2e^{x_1^2 + 2x_2^2}. \end{aligned}$$

Кривые $h_{11} = 0$ и $h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21} = 0$, определяющие область выпуклости, являются трансцендентными, их графики приводятся на рис. 3.4, а на рис. 3.4 изображена заданная функция. Из рисунка видно, что глобальный минимум находится на границе области, там где функция не выпукла. Чтобы алгоритм сходился к этой точке, в функции (2) отбросим корень и с помощью штрафных функций сделаем условную минимизацию с неравенством $1 + 2x_1 + x_2^2 \leq 0$, т.е. будем минимизировать функцию

$$\hat{f}(x_1, x_2) = e^{x_1^2 + 2x_2^2} - x_1 - x_2 + 10000(\max(0, 1 + 2x_1 + x_2^2))^2$$

ее график приведен на рис. 3.4.

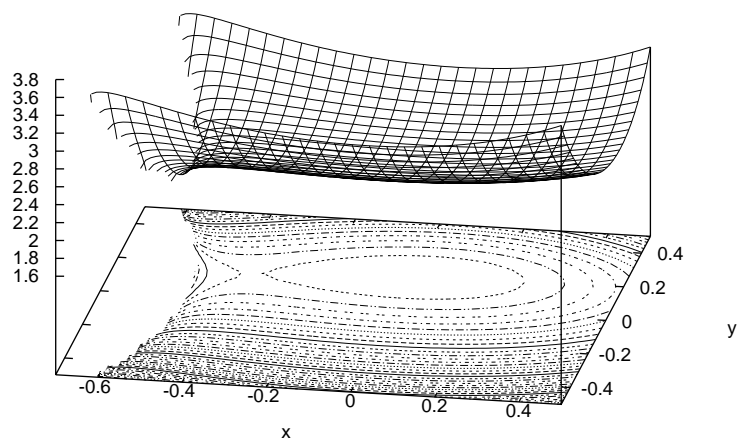


Рис. 6. Функция $f(x_1, x_2) = \sqrt{1 + 2x_1 + x_2^2} + e^{x_1^2 + 2x_2^2} - x_1 - x_2$

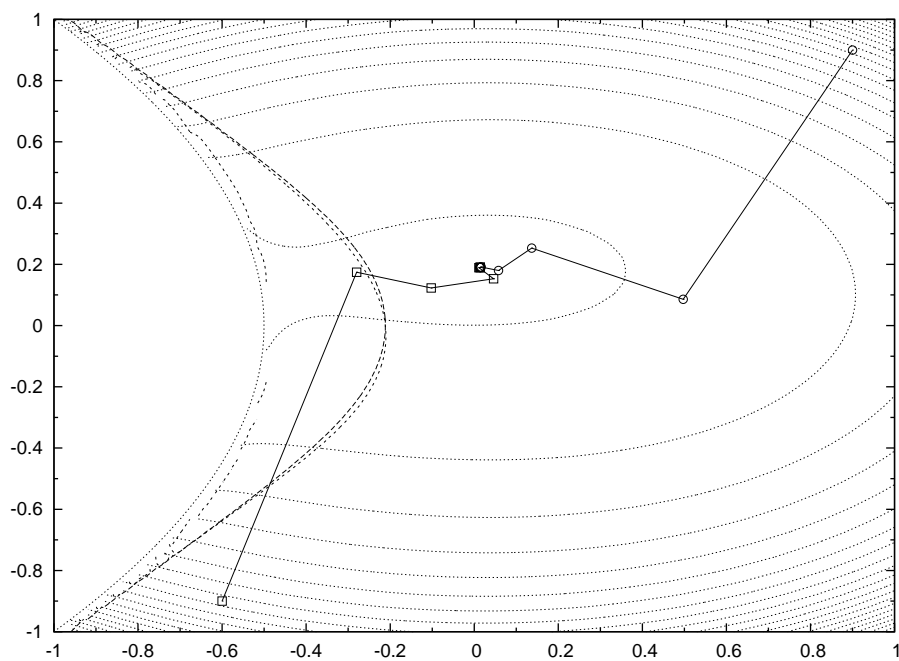


Рис. 7. Нахождение локального минимума в области выпуклости

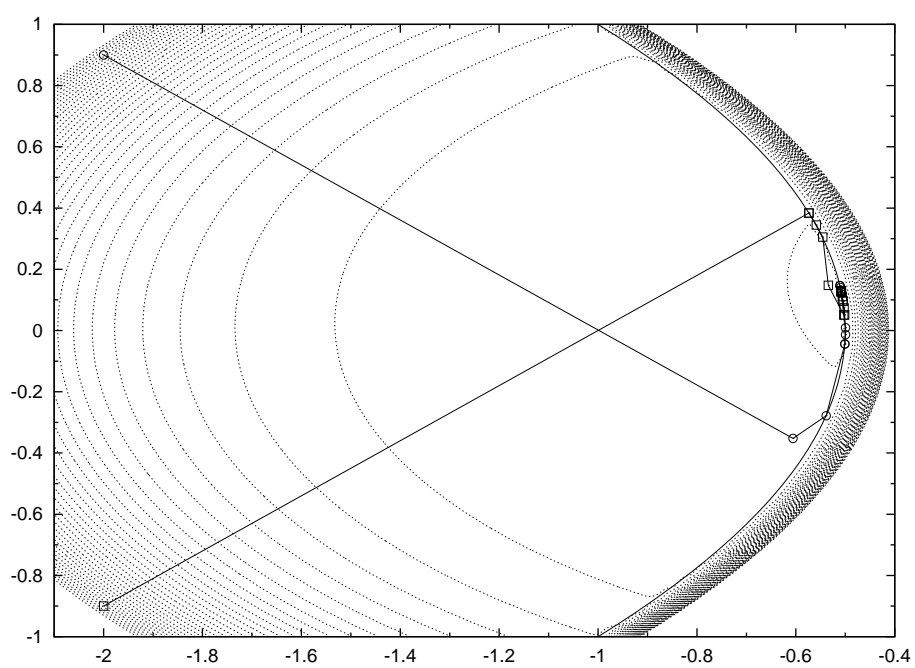


Рис. 8. Нахождение глобального минимума

4. Штрафные функции

Для численного решения нелинейной оптимизации применяют метод штрафных функций. Суть метода заключается в том, что функцию в области не удовлетворяющей условиям ее делают сингулярной. К примеру есть функция с ограничениями

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min, \\ g_i(x) &\leq 0, i = 1 \dots n \end{aligned}$$

Для нее можно построить штрафную функцию

$$p(x) = h \sum_{i=1}^n (\max(0, g_i(x)))$$

которая будет сохранять непрерывную производную и будет большой, при большом параметре штрафа h .

Приложение А

Исходный текст программы главного файла main.cpp

```
#include <iostream>
#include <cmath>
#include "matrix.h"
#include "functionals.h"

/// оптимальные значения констант:
/// "const" >= 1e-9, иначе 1 + const = 1
/// EPSILON >= 2e-9
/// DIFF_STEP >= 1e-6, иначе погрешность дифференцирования сильно возрастает
/// MATRIX_EPS ~~ 1e-1, иначе интервал унимодальности находится не верно,
/// min_s -> infinity и программа может думать очень долго
///
/// оптимальные константы, если включены штрафы:
/// 1/TAX ~~ EPSILON, так как 1/TAX ~~ точность решения, если 1/TAX > EPSILON;
/// однако когда алгоритму надо идти вдоль границы области 1/TAX >> EPSILON
/// если 1/TAX > 2*DIFF_STEP, то будут ошибки определения производной на границе
#define GOLD_EPS 1e-9           ///точность одномерной минимизации
#define DIFF_STEP 1e-5          ///шаг дифференцирования
#define EPSILON 5e-9            ///правило останова
#define NORM_EPS 1e-4           ///для определения нулевой нормы[в s_unimodal]
#define UNIM_STEP 0.1           ///шаг для определения интервала унимодальности
#define TAX 1e4                 ///параметр штрафа

#define _X_0_ 0.1, 2.8          ///начальная точка[обязательно double, double]
#define DEBUG (0)               ///отладочный\итоговый вывод программы

/// глобальные переменные
vector x_k(2);
```

```

matrix D(2, 2); //приближенная матрица Гессе

/// штрафная функция (g[i] <= 0)
double penalty(vector x)
{
    double pnt = 0;
    //pnt += pow(max(0, x[0]*x[0] + 2*(x[1]-2) - 8), 2); //УНЛО
    //pnt += pow(max(0, 1 - x[0]*x[0] - (x[1]-2)*(x[1]-2)), 2);

    //pnt += pow(max(0, -x[0]), 2); //проверка штрафов
    //pnt += pow(max(0, -x[1]), 2);
    //pnt += pow(max(0, x[0]*x[0] + x[1]*x[1] - 1), 2);

    pnt += pow(max(0, 1 + 2*x[0] + x[1]*x[1]), 2); //исправленное задание
    return TAX * pnt;
}

/// целевая функция
double f(vector x)
{
    //return x[0]*x[0] + x[1]*x[1] + penalty(x); //УНЛО
    //return pow(x[0] + 1, 2) + pow(x[1] - 1, 2) + penalty(x); //проверка штрафов
    //return 100 * pow(x[1] - x[0]*x[0], 2) + pow(1 - x[0], 2); //тест Розенброка
    //return 100 * pow(x[1] - 2*pow(x[0], 3) + 2*x[0], 2) + x[0]*x[0]; //мой тест
    return - (pow(x[0]*x[0]+x[1]-11, 2) + pow(x[0]+x[1]*x[1]-7, 2)); //Химмельблау
    //return exp(x[0]*x[0] + 2*x[1]*x[1]) - x[0] - x[1] + penalty(x); //исп задание
    //return sqrt((1 + 2*x[0] + x[1]*x[1])) + exp(x[0]*x[0] + \
    // 2*x[1]*x[1]) - x[0] - x[1]; //задание
}

/// градиент целевой функции
/// дифференцирование производится с точностью до 4-го порядка малости от h
vector grad_f(vector x)
{
    double h = DIFF_STEP;
    vector g(2);
    vector dx0(2);
    vector dx1(2);
    init(dx0, h, 0.0);
    init(dx1, 0.0, h);
    g[0] = (f(x - 2*dx0) - 8*f(x - dx0) + 8*f(x + dx0) - f(x + 2*dx0)) / 12 / h;
    g[1] = (f(x - 2*dx1) - 8*f(x - dx1) + 8*f(x + dx1) - f(x + 2*dx1)) / 12 / h;
    return g;
}

/// функция возвращает f(x<k+1>)[нужна для золотого сечения]
inline double f_x_kk(double s)
{
    extern vector x_k;
    extern matrix D;
    return f(x_k - s*D*grad_f(x_k));
}

/// опр-ет интервал унимодальности, для применения в нем метода золотого сечения

```

```

/// для этого увеличивает s до тех пор, пока f(x) не начнет возрастать
void s_unimodal(double& s_min, double& s_max, double unim_step)
{
    extern vector x_k;
    extern matrix D;
    double s0 = 0;
    double s1 = unim_step;
    double s2 = 2*unim_step;
    int n = 0;
    while ((f_x_kk(s1) > f_x_kk(s2)) && norm(D*grad_f(x_k)) > NORM_EPS && (++n < 1e4))
    {
        s0 = s1;
        s1 = s2;
        s2 += unim_step;
    }
    s_min = s0;
    s_max = s2;
}

int main()
{
    /// 0-й шаг
    extern vector x_k;
    extern matrix D;
    int k;
    matrix A(2, 2);
    matrix B(2, 2);
    vector x_kk(2);
    vector u(2);
    vector v(2);
    double s;
    double s_min, s_max;

    k = 1;
    x_k = vector(2);
    init(x_k, _X_0_);
    D = identity(2);

    /// 1 шаг
    s_unimodal(s_min, s_max, UNIM_STEP / norm(grad_f(x_k)));
    s = golden_section(f_x_kk, s_min, s_max, GOLD_EPS); ///метод золотого сечения
    x_kk = x_k - s*D*grad_f(x_k);
    printf("#      X      Y      Z      n\n");
    printf("%15.12lf %15.12lf %15.12lf %d\n", x_k[0], x_k[1], f(x_k), k-1);
    printf("%15.12lf %15.12lf %15.12lf %d\n", x_kk[0], x_kk[1], f(x_kk), k);

    /// 2..n шаг
    do
    {
        u = x_kk - x_k;
        v = grad_f(x_kk) - grad_f(x_k);
        A = u * transpose(u) / (transpose(u) * v);
        B = (D * v * transpose(v) * D) / (- (transpose(v) * D * v));
        D += A + B;
    }

```

```

        k++;
        x_k = x_kk;                                     ///x<k+1>
        s_unimodal(s_min, s_max, UNIM_STEP);
        s = golden_section(f_x_kk, s_min, s_max, GOLD_EPS);
        x_kk = x_k - s*D*grad_f(x_k);
        printf("%15.12lf %15.12lf %15.12lf  %d\n", x_kk[0], x_kk[1], f(x_kk), k);
    } while (norm(x_kk - x_k) > EPSILON);

    putchar('\n');
    return 0;
}

```

Список литературы

- [1] *Х. А. Таха* Введение в исследование операций, Пер. с англ., — М.:Вильямс, 2005. — 912 с.
- [2] *А.В. Аттетков, С.В. Галкин* Методы оптимизации. —М.:МГТУ, 2001. —440 с.
- [3] *Д.М. Химмельблау* Методы оптимизации. —М.:Мир, 1975. —531 с.