

**МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ**  
(Государственный технический университет)

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ**

*по курсам*

**«ТЕОРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ и ЧИСЛЕННЫЕ  
МЕТОДЫ»**

**«МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ»**

**АЛГОРИТМЫ МЕТОДОВ БЕЗУСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ,  
РЕАЛИЗОВАННЫЕ В ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ**

С.Ю. Лунева

**Москва, 2004**

## Содержание

Методы первого порядка .....	2
(1) Метод градиентного спуска .....	2
(2) Метод градиентного наискорейшего спуска .....	4
(3) Метод покоординатного спуска .....	6
(4) Метод Гаусса-Зейделя (наискорейшего покоординатного спуска) .....	7
(5) Метод сопряженных градиентов .....	8
Методы второго порядка .....	10
(6) Метод Ньютона .....	10
(7) Метода Ньютона-Рафсона .....	11
Методы нулевого порядка .....	12
(8) Метод конфигураций (Хука-Дживса) .....	12
(9) Метод Нелдера-Мида (деформируемого многогранника) .....	14
(10) Метод случайного поиска (адаптивный метод случайного спуска) .....	17

## Методы первого порядка

### (1) Метод градиентного спуска

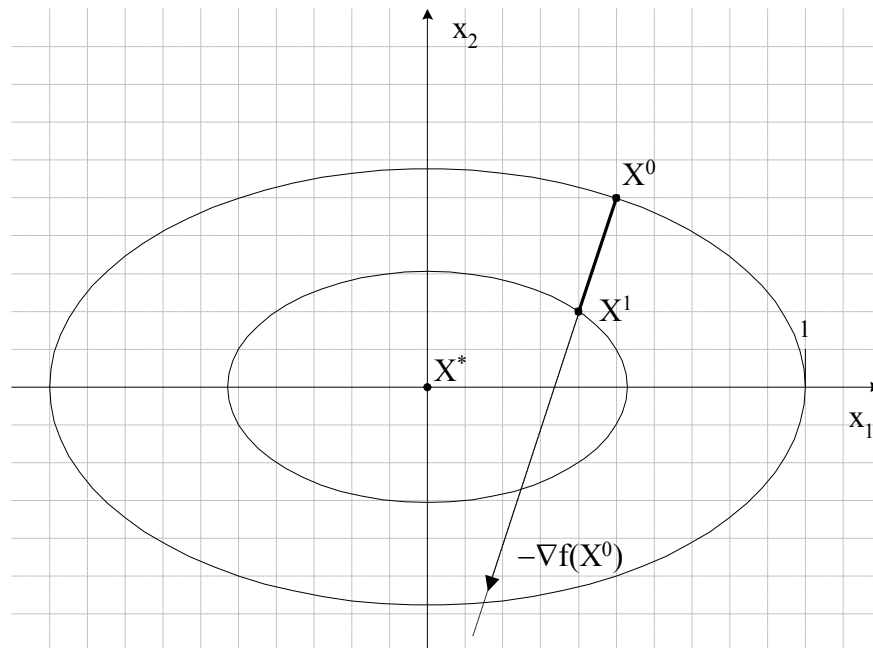
Алгоритм метода:  $X^{k+1} = X^k - t_k \nabla f(X^k)$  (1.1)

здесь:

□  $d^k = -\nabla f(X^k)$  - направление антиградиента функции; (1.2)

□  $t_k$  - шаг выбирается из условия убывания функции в точках последовательности:  
 $f(X^{k+1}) < f(X^k)$ . (1.3)

Геометрическая интерпретация метода:



Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число,} \quad (1.4)$$

здесь  $\|\nabla f(X^k)\| = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}$

Начальные параметры метода:  $X^0, t_0, \varepsilon$ .

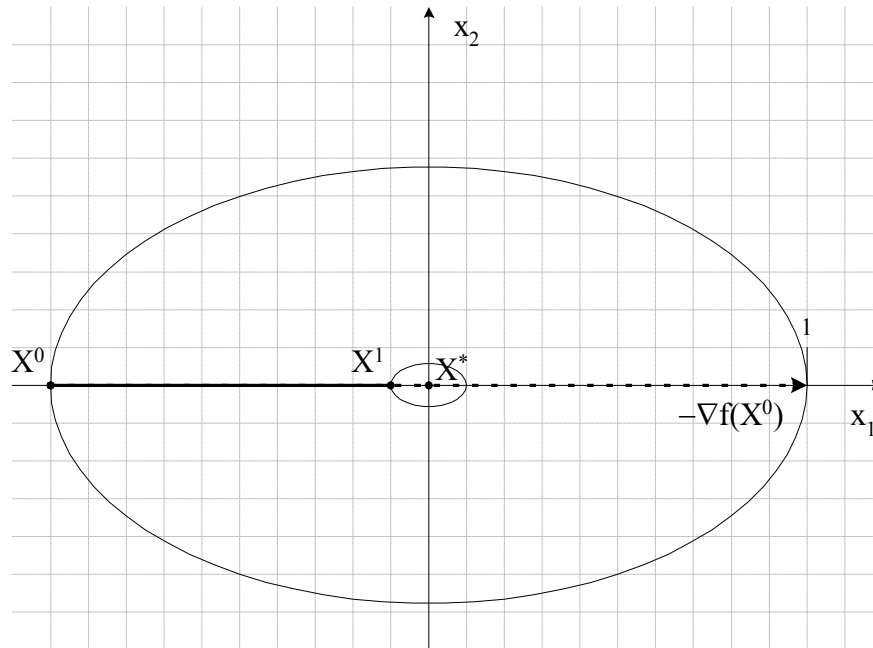
Изменяемый параметр метода: величина шага  $t_k$ .

**Особенности реализации алгоритма.** Вопрос о величине шага на каждой итерации решается пользователем, причем шаг может быть, как уменьшен, если не выполняется условие (1.3), так и увеличен, если скорость сходимости алгоритма невысока (по субъективной оценке пользователя).

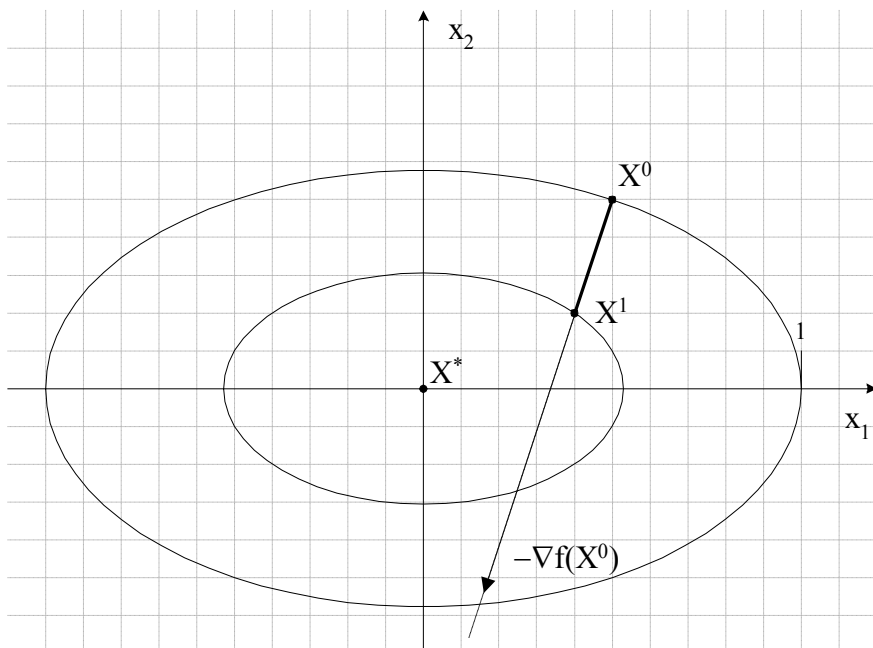
**Рекомендации по выбору параметров метода**

Согласно алгоритму метода, каждая последующая точка  $X^{k+1}$  в методе градиентного спуска ищется в направлении  $-\nabla f(X^k)$  направлении антиградиента функции, построенном в текущей точке  $X^k$ . Поэтому, если направление антиградиента в текущей точке приблизительно совпадает с направлением на минимум (согласно чертежу), шаг следует увеличить, чтобы ускорить процесс сходимости, если же направление антиградиента сильно отличается от направления на минимум, шаг уменьшают, в противном случае функция может уменьшиться несущественно или даже возрасти.

На нижнем рисунке слева представлен случай, когда текущий шаг следует увеличить, а на рисунке справа – когда нужно уменьшить



Текущий шаг нужно увеличить



Текущий шаг нужно уменьшить

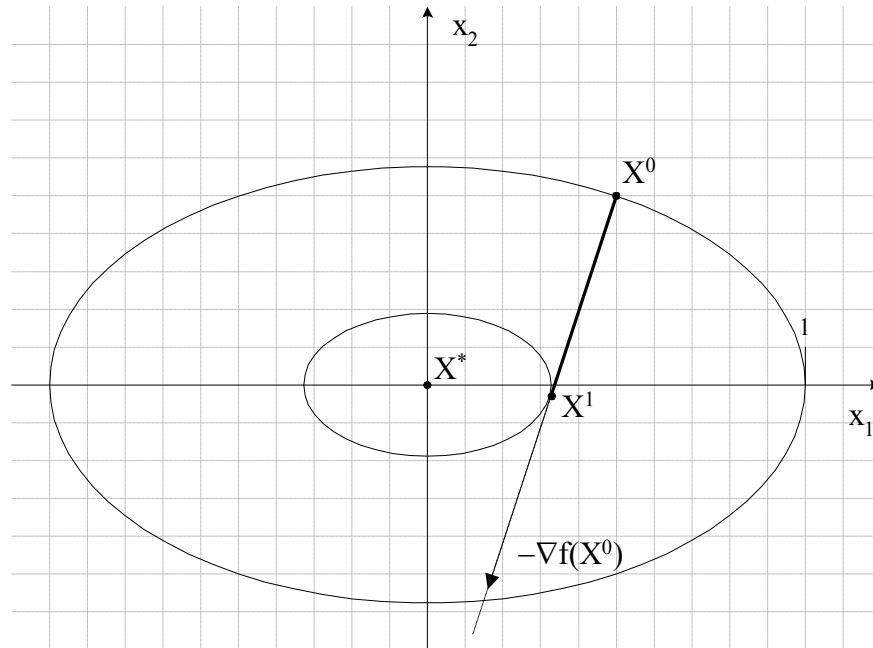
**(2) Метод градиентного наискорейшего спуска**

Алгоритм метода:  $X^{k+1} = X^k - t_k \nabla f(X^k)$  (2.1)

здесь

□  $d^k = -\nabla f(X^k)$  - направление антиградиента функции (2.2)

□  $t_k$  - шаг вычисляется из условия наибольшего убывания функции в точках последовательности, построенной по закону (2.1):  $t_k = \arg \min[f(X^{k+1})]$  (2.3)

Геометрическая интерпретация метода

В методе наискорейшего градиентного спуска последующая точка  $X^{k+1}$  минимизирующей последовательности также ищется в направлении  $-\nabla f(X^k)$ - направлении антиградиента функции, построенном в текущей точке, но условия вычисления шага позволяют определить наилучшее положение точки  $X^{k+1}$  на этом направлении. Как видно из чертежа, точка  $X^1$  принимает на направлении спуска  $d^0 = -\nabla f(X^0)$  предельное положение, которое характеризуется тем, что линия уровня, проходящая через точку  $X^1$  касается направления спуска, а, следовательно, в точках минимизирующей последовательности, построенной по методу градиентного наискорейшего спуска выполняется условие:

$$\nabla f(X^k) \perp \nabla f(X^{k+1}) \Rightarrow (\nabla f(X^k), \nabla f(X^{k+1})) = 0 \quad (2.4)$$

Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (2.5)$$

При решении задачи поиска оптимального шага  $t_k = \arg \min(f(X^{k+1}))$ , функция  $f(X^{k+1})$  становится функцией одной переменной  $\varphi(t_k)$ , т.к.  $X^{k+1} = X^k - t_k \nabla f(X^k)$ , а  $X^k$  и  $\nabla f(X^k)$  известны. Следовательно, задача о поиске оптимального шага  $t_k$  - это задача  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k) \rightarrow \min$ , которая в лабораторной работе решается численно методом дихотомии (см. [2], глава II, §5, п. 5.1.4.) на отрезке  $[a, b]$  с заданной точностью  $\varepsilon_D$ .

Начальные параметры метода:  $X^0$ ,  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_D$ .

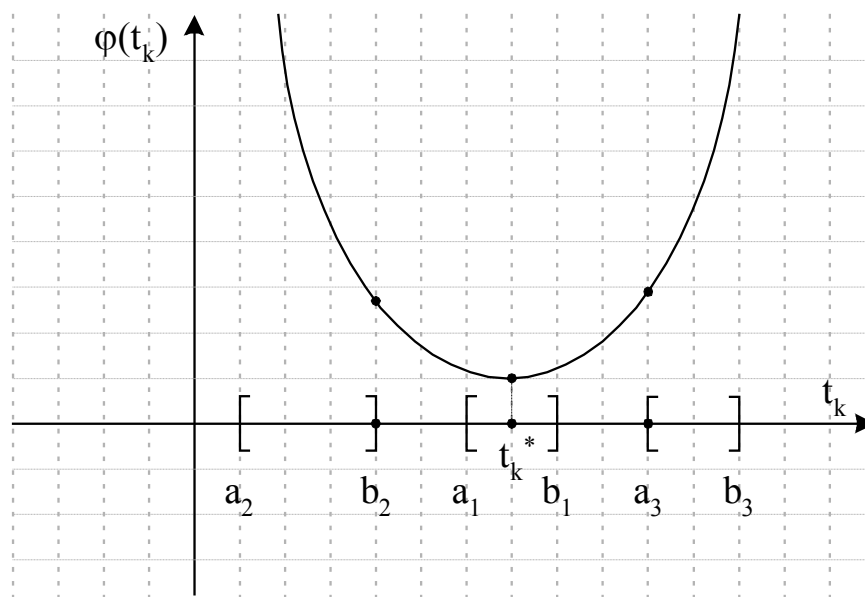
Изменяемые параметры метода: отрезок для уточнения шага  $[a, b]$ .

**Особенности реализации алгоритма.** Вопрос о границах отрезка  $[a, b]$  на каждой итерации решается пользователем.

**Рекомендации по выбору параметров метода.**

При задании на каждой итерации отрезка  $[a, b]$  для уточнения шага, следует помнить, что искомое решение может лежать как внутри, так и на границе интервала  $[a, b]$ .

Проиллюстрируем ситуацию, при которой шаг  $t_k$  вычисляется численно методом дихотомии. Для этого построим график функции  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k)$ , которая в случае если  $f(X)$  является квадратичной функцией, имеет вид:  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k) = At_k^2 + Bt_k + C$ .



Для вычислений по методу дихотомии должен быть задан отрезок для уточнения оптимального значения шага.

Как видно из чертежа, если в качестве отрезка будет выбран  $[a_1, b_1]$ , оптимальное значение шага при котором функция  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k)$  принимает минимальное значение, окажется внутри отрезка и метод с заданной точностью  $\varepsilon_D$  отыщет это значение, если же отрезок будет  $[a_2, b_2]$  в качестве результата счета по методу дихотомии будет получено значение  $t_k = b_2$  - как дающее наименьшее значение функции  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k)$  на отрезке, аналогично при выборе отрезка  $[a_3, b_3]$  будет получено значение  $t_k = a_3$ .

Таким образом, отрезок для уточнения оптимального шага должен быть достаточно большим, чтобы гарантировано включать искомое значение шага. Признаками неверного задания отрезка  $[a, b]$  являются: отсутствие касания траектории спуска из точки  $X^k$  и линии уровня функции через точку  $X^{k+1}$ , а также равенство величины оптимального шага величине одной из границ отрезка  $[a, b]$ .

**(3) Метод покоординатного спуска**

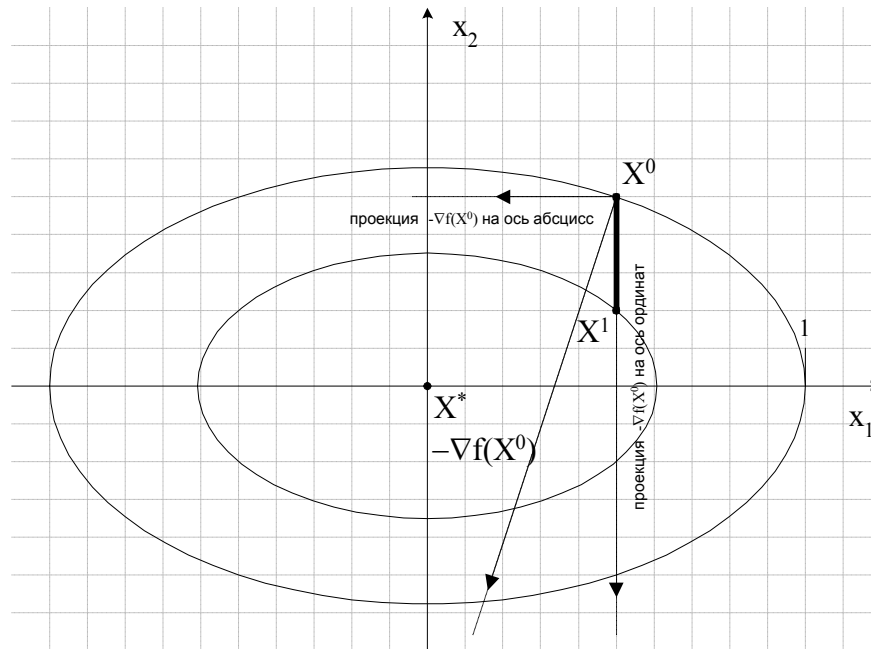
Алгоритм метода: 
$$X^{k+1} = X^k - t_k \left[ \nabla f(X^k) \right]_{\text{пр на } x_i} \quad (3.1)$$

здесь:

□  $d^k = -\left[ \nabla f(X^k) \right]_{\text{пр на } x_i}$  - проекция на ось  $x_i$  антиградиента функции (3.2)

□  $t_k$  - шаг выбирается из условия убывания функции в точках последовательности:  
 $f(X^{k+1}) < f(X^k)$  (3.3)

Геометрическая интерпретация метода



Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\| \nabla f(X^k) \| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (3.4)$$

Начальные параметры метода:  $X^0, t_0, \varepsilon$ .

Изменяемые параметры метода: величина шага  $t_k$  и направление проекции антиградиента (здесь абсциссы – ось  $x$ , ординаты – ось  $y$ )

**Особенности реализации алгоритма.** Вопрос о величине шага на каждой итерации решается пользователем, причем шаг может быть, как уменьшен, если не выполняется условие (3.3), так и увеличен, если скорость сходимости алгоритма невысока (по субъективной оценке пользователя). Вопрос о выборе направления оси для проекции антиградиента, также решается пользователем на каждой итерации.

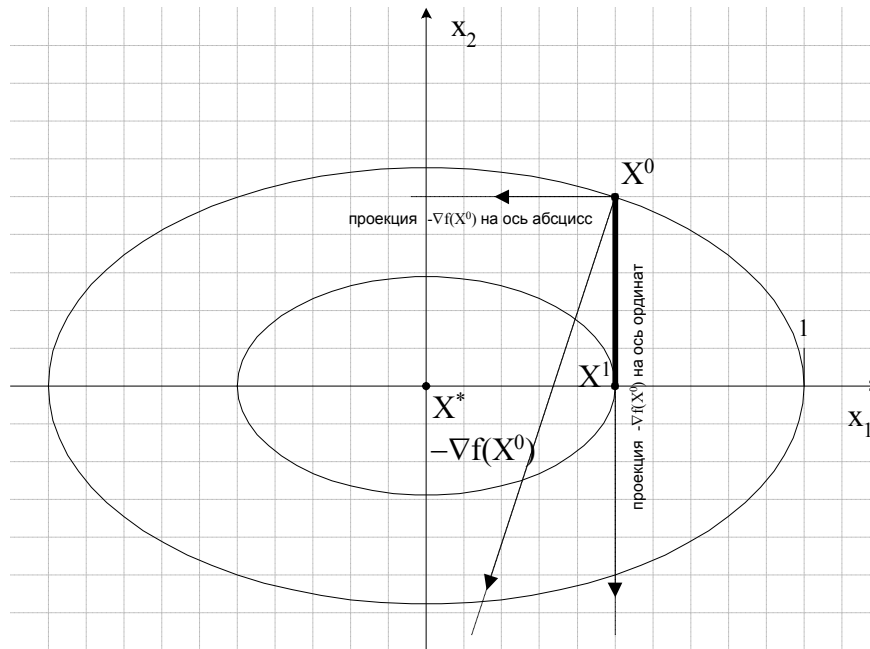
**(4) Метод Гаусса-Зейделя (наискорейшего покоординатного спуска)**

Алгоритм метода: 
$$X^{k+1} = X^k - t_k \left[ \nabla f(X^k) \right]_{\text{пр на } x_i} \quad (4.1)$$

здесь:

□  $d^k = -\left[ \nabla f(X^k) \right]_{\text{пр на } x_i}$  - проекция на ось  $x_i$  антиградиента функции (4.2)

□  $t_k$  - шаг вычисляется из условия наибольшего убывания функции в точках последовательности, построенной по закону (4.1):  $t_k = \arg \min[f(X^{k+1})]$  (4.3)

Геометрическая интерпретация метода

Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (4.4)$$

Задача о поиске оптимального шага  $t_k$  (задача  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k) \rightarrow \min$ ) решается численно методом дихотомии (см. [2], глава II, §5, п. 5.1.4.) на отрезке  $[a, b]$  с заданной точностью  $\varepsilon_D$ . (см. пояснения к методу наискорейшего спуска).

Начальные параметры метода:  $X^0, \varepsilon, \varepsilon_D$ .

Изменяемые параметры метода: отрезок для уточнения шага  $[a, b]$ .

**Особенности реализации алгоритма.** Вопрос о границах отрезка  $[a, b]$  на каждой итерации решается пользователем. Направление проекции градиента меняется циклически: сначала спуск в направлении оси абсцисс, затем – ординат и т.д.

**Рекомендации по выбору параметров метода.**

Отрезок  $[a, b]$  задается из тех же соображений, что и в методе наискорейшего спуска.



**(5) Метод сопряженных градиентов**

(Для квадратичных функций метод сопряженных градиентов называется методом Флетчера-Ривса)

Алгоритм метода:  $X^{k+1} = X^k + t_k d^k$  (5.1)

здесь:

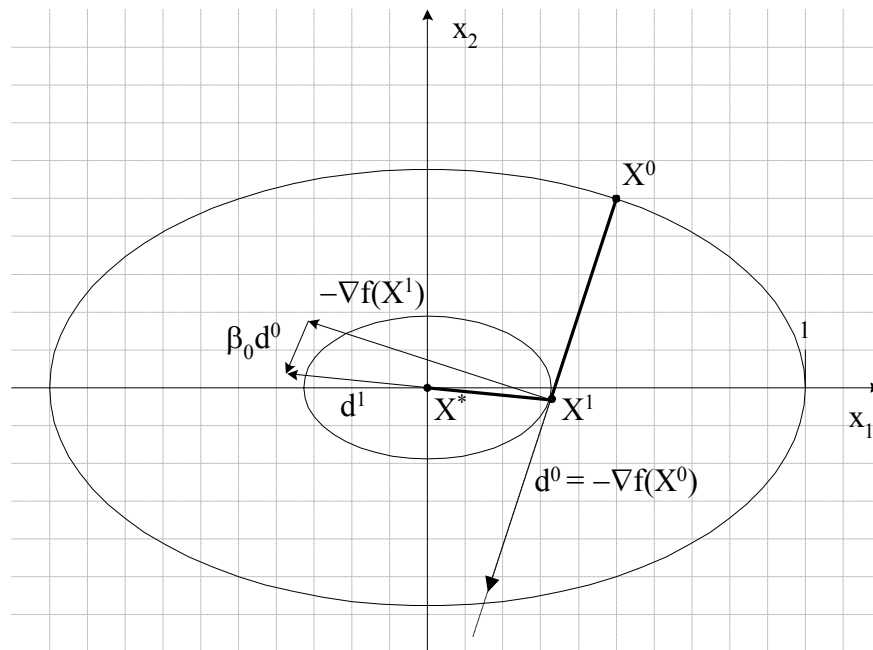
$$\square d^0 = -\nabla f(X^0) \quad (5.2)$$

$$\square d^k = -\nabla f(X^k) + \beta_{k-1} d^{k-1} \quad (5.3)$$

$$\square \beta_{k-1} = \frac{\|\nabla f(X^k)\|^2}{\|\nabla f(X^{k-1})\|^2} \quad (5.4)$$

$$\square t_k - \text{ шаг вычисляется из условия наибольшего убывания функции в точках последовательности, построенной по закону (5.1): } t_k = \arg \min[f(X^{k+1})] \quad (5.5)$$

Из формул (5.2) и (5.5) следует, что первая итерация метода сопряженных градиентов совпадает с первой итерацией метода наискорейшего спуска.

Геометрическая интерпретация метода

Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (5.6)$$

Вычисление величины  $\beta_{k-1}$  по формуле (5.4) обеспечивает для квадратичных функций построение последовательности  $H$ -сопряженных направлений  $d^0, d^1, \dots, d^k, \dots$ , для которых  $(d^i, H d^j) = 0, \forall i, j = 0, 1, \dots, k; i \neq j$ . При этом в точках последовательности  $\{X^k\}$  градиенты функции  $f(X)$  взаимно перпендикулярны, т.е.  $(\nabla f(X^k), \nabla f(X^{k+1})) = 0, k = 0, 1, \dots$

Задача о поиске оптимального шага  $t_k$  (задача  $f(X^{k+1}) = \varphi(t_k) \rightarrow \min$ ) решается численно методом дихотомии (см. [2], глава II, §5, п. 5.1.4.) на отрезке  $[a, b]$  с заданной точностью  $\varepsilon_D$ . (см. пояснения к методу наискорейшего спуска).

Начальные параметры метода:  $X^0$ ,  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_D$ .

Изменяемые параметры метода: отрезок для уточнения шага  $[a, b]$ .

**Особенности реализации алгоритма.** Вопрос о границах отрезка  $[a, b]$  на каждой итерации решается пользователем.

**Рекомендации по выбору параметров метода.**

Отрезок  $[a, b]$  задается из тех же соображений, что и в методе наискорейшего спуска.

Доказано, что для функций, имеющих минимум, метод Флетчера-Ривса сходится за конечное число шагов, не превышающее число переменных функции  $f(X)$ .

**Замечание.** Т.к. шаг  $t_k$  на каждой итерации вычисляется численно с точностью  $\varepsilon_D$ , за счет накопления ошибки, метод сопряженных градиентов в отдельных случаях может сходиться для квадратичной функции за число итераций, превышающее число переменных на 1.

## Методы второго порядка

### (6) Метод Ньютона

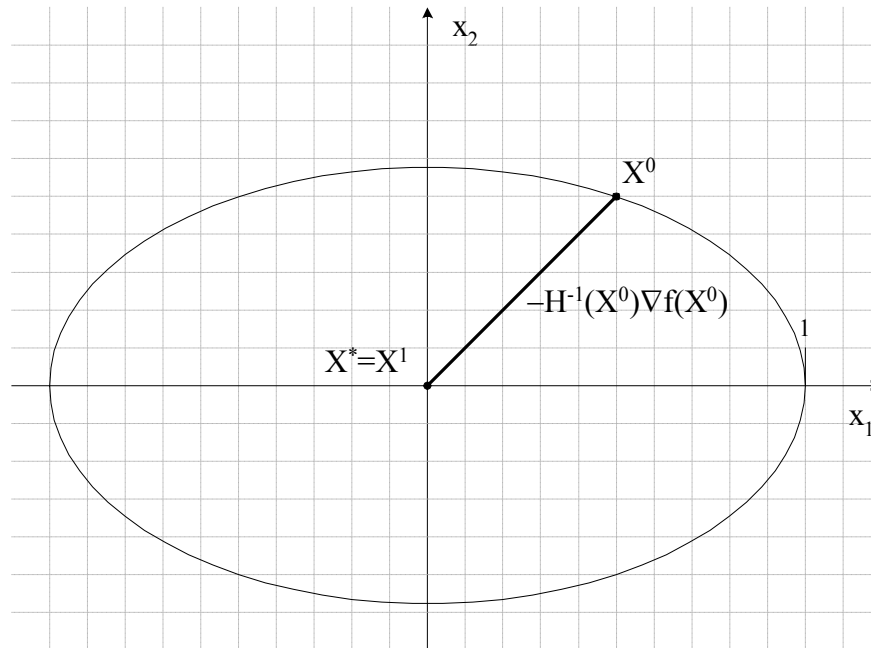
Алгоритм метода:  $X^{k+1} = X^k - H^{-1}(X^k)\nabla f(X^k)$  (6.1)

здесь:

□  $d^k = -H^{-1}(X^k)\nabla f(X^k)$  - направление спуска (6.2)

□  $t_k = 1$  (6.3)

Геометрическая интерпретация метода для квадратичной функции:



Основной критерий окончания метода:

Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (6.4)$$

Начальные параметры метода:  $X^0, \varepsilon$ .

Особенностью метода Ньютона является то, что при  $H(X^0) > 0$  метод позволяет отыскать минимум квадратичной функции **за одну итерацию**.

**(7) Метода Ньютона-Рафсона**

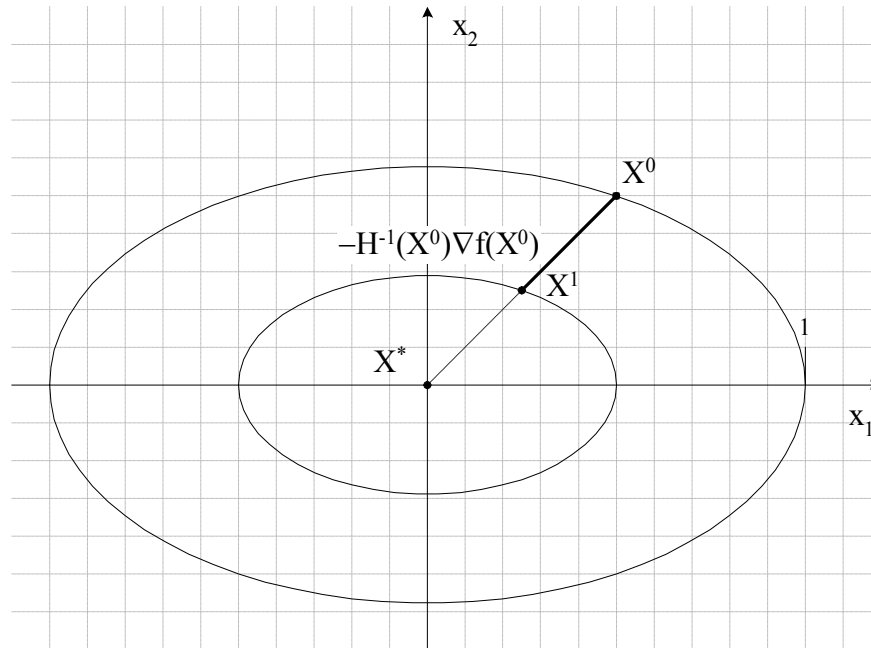
Алгоритм метода:  $X^{k+1} = X^k - t_k H^{-1}(X^k) \nabla f(X^k)$  (7.1)

здесь:

□  $d^k = -H^{-1}(X^k) \nabla f(X^k)$  - направление спуска (7.2)

□  $t_k$  - шаг выбирается из условия убывания функции в точках последовательности:  
 $f(X^{k+1}) < f(X^k)$ . (7.3)

Геометрическая интерпретация метода для квадратичной функции:



Основной критерий окончания метода:

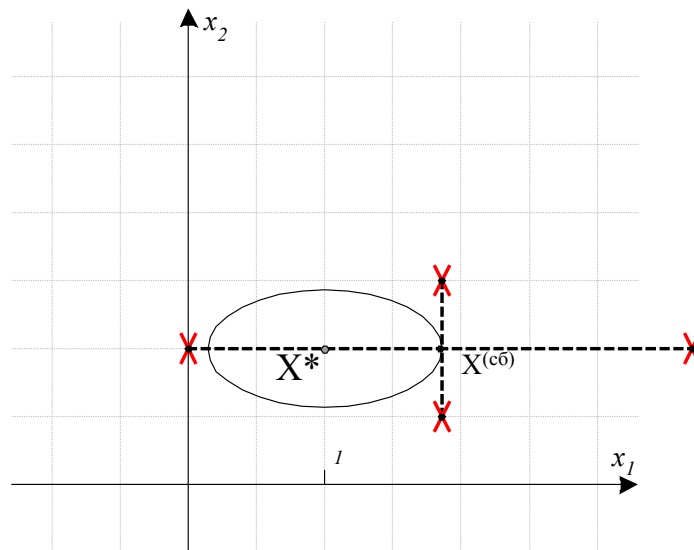
Построение последовательности заканчивается в точке, для которой:

$$\|\nabla f(X^k)\| < \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ заданное малое положительное число.} \quad (7.4)$$

Начальные параметры метода:  $X^0, \varepsilon$ .

Изменяемый параметр метода: величина шага  $t_k$ .

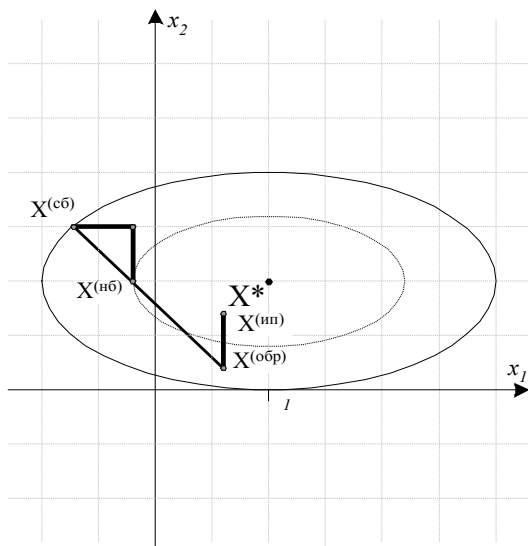




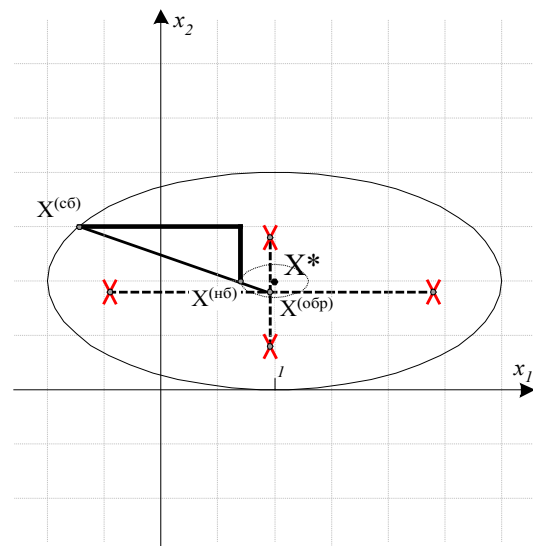
Неудачный исследующий поиск

3) Из точки нового базиса может быть:

- продолжен исследующий поиск со старыми или новыми значениями приращений (шаг 2) алгоритма)
- проведен поиск по образцу по алгоритму:  $X^{обр} = X^k + t_k(X^k - X^{k-1})$



Удачный поиск по образцу



Неудачный поиск по образцу

В точке  $X^{обр}$  значение функции не вычисляется, из этой точки проводится исследующий поиск, в результате которого получается точка  $X^{ип}$ .

Если  $X^{ип} \neq X^{обр}$ , то точка  $X^{k+1} = X^{ип}$  становится точкой нового базиса, а  $X^k$  - точкой старого базиса. Если  $X^{ип} = X^{обр}$ , то поиск по образцу считается неудачным, точки  $X^{ип}$ ,  $X^{обр}$  - аннулируются, при этом точка  $X^k$  остается точкой нового базиса, а  $X^{k-1}$  - точкой старого базиса.

4) Процедура 3) повторяется до выполнения критерия окончания счета.

Основной критерий окончания метода:  $dx^k \leq \varepsilon$ ,  $dy^k \leq \varepsilon$

Начальные параметры метода:  $X^0$ ,  $\varepsilon$ , начальные значение приращений  $dx^0$ ,  $dy^0$ .

Изменяемый параметр метода: величины приращений  $dx^k$ ,  $dy^k$ .

**(9) Метод Нелдера-Мида (деформируемого многогранника)**

Алгоритм метода (на примере функции двух переменных):

1) Задается начальная система точек (многогранник), включающая в себя 3 точки:  
 $X^{0(1)}, X^{0(2)}, X^{0(3)}$

2) Вычисляется значение функции во всех точках многогранника и выбирается:  
 лучшая точка  $X^{(л)}: f(X^{(л)}) = \min_i [f(X^{k(i)})]$  (здесь k - номер итерации, i - номер точки)  
 худшая точка  $X^{(х)}: f(X^{(х)}) = \max_i [f(X^{k(i)})]$

Далее заданная система точек перестраивается, для этого:

3) Строится центр тяжести системы заданных точек за исключением худшей:

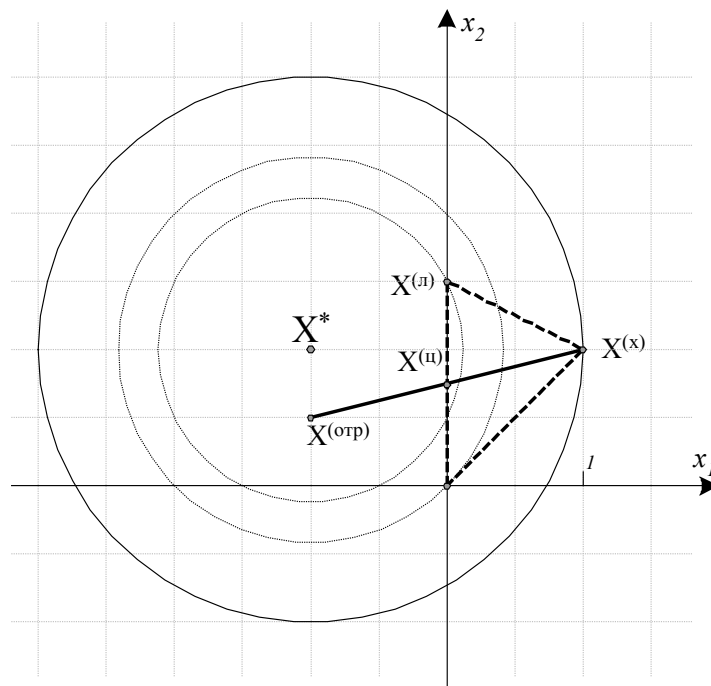
$$X^{(ц)} = \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^{n-1} X^{k(i)} - X^{(х)} \right)$$

(для функции 2-х переменных точка  $X^{(ц)}$  - середина отрезка, соединяющего точки за исключением худшей)

4) Выполняется операция отражение худшей точки через центр тяжести:

$$X^{(отр)} = X^{(ц)} + \alpha \cdot (X^{(ц)} - X^{(х)}),$$

здесь  $\alpha > 0$  - параметр отражения (рекомендуемое значение  $\alpha = 1$ ).

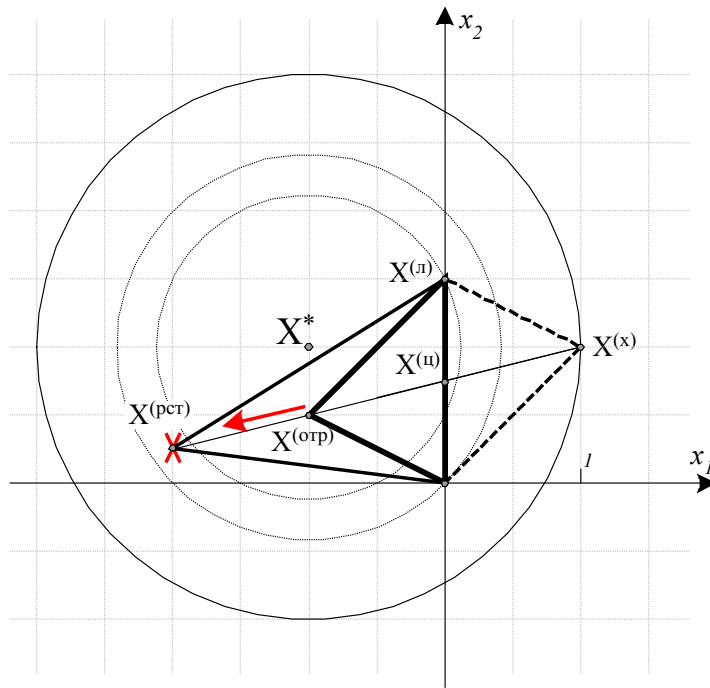


5) Формируется новая система точек (многогранник). Для этого в точке  $X^{(отр)}$  вычисляется значение функции, полученное значение сравнивается с  $f(X^{(л)})$ :

□ если  $f(X^{(отр)}) < f(X^{(л)})$  выполняется операция растяжение:

$$X^{(рст)} = X^{(ц)} + \gamma(X^{(отр)} - X^{(ц)}),$$

здесь  $\gamma > 0$  ( $\gamma \neq 0$ ) - параметр растяжения (рекомендованное значение  $\gamma \in [2, 3]$ )

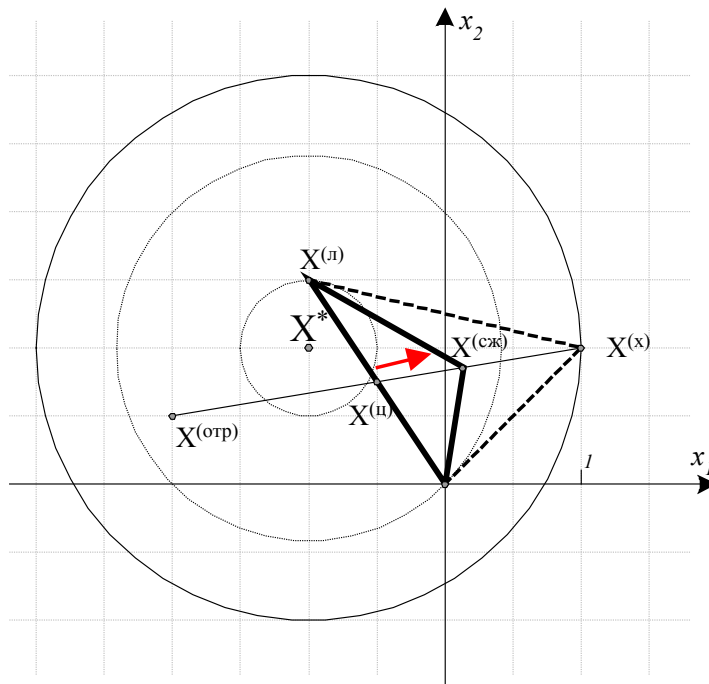


При этом если  $f(X^{(рст)}) < f(X^{(отр)})$ , то в новой системе точек точка  $X^{(x)}$  будет заменена на  $X^{(рст)}$ , если же  $f(X^{(рст)}) \geq f(X^{(отр)})$ , то в новой системе точек точка  $X^{(x)}$  будет заменена на  $X^{(отр)}$ .

- если  $f(X^{(л)}) \leq f(X^{(отр)}) < f(X^{(x)})$  выполняется операция сжатие:

$$X^{(сж)} = X^{(ц)} + \beta(X^{(x)} - X^{(ц)}),$$

здесь  $\beta > 0$  ( $\beta \neq 0$ ) - параметр сжатия (рекомендованное значение  $\beta \in [0.4, 0.6]$ ).

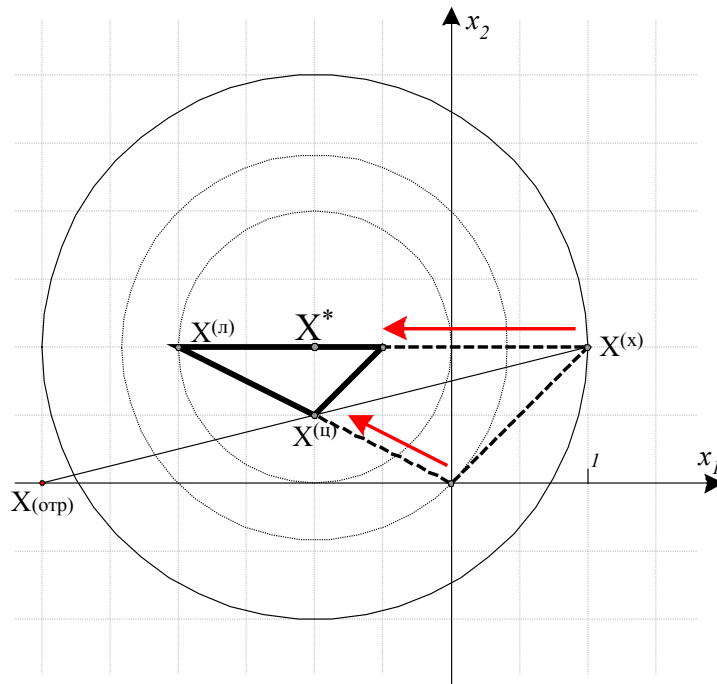




При этом если  $f(X^{(сж)}) < f(X^{(отр)})$ , то в новой системе точек точка  $X^{(x)}$  будет заменена на  $X^{(сж)}$ , если же  $f(X^{(сж)}) \geq f(X^{(отр)})$ , то в новой системе точек точка  $X^{(x)}$  будет заменена на  $X^{(отр)}$ .

- если  $f(X^{(отр)}) \geq f(X^{(x)})$  выполняется операция редукции: при этом формируется новый многогранник, содержащий точку  $X^{(п)}$  с уменьшенными вдвое сторонами:

$$X^{k+1(i)} = X^{(п)} + 0.5(X^{k(i)} - X^{(п)}), \quad i = 1..n + 1$$



Т.о. в результате выполнения этого пункта алгоритма формируется новая система точек (многогранник), причем в случае возникновения операций растяжения и сжатия перестраивается только одна точка -  $X^{(x)}$ , в случае возникновения операции редукции – все точки, за исключением  $X^{(п)}$ .

6) Процедура 2)-5) повторяется до выполнения критерия окончания счета.

Основной критерий окончания метода:  $\sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} [f(X^{k(i)}) - f(X^{(п)})]^2} \leq \varepsilon$

Начальные параметры метода:  $X^{0(1)}, X^{0(2)}, X^{0(3)}, \varepsilon$ .

**(10) Метод случайного поиска (адаптивный метод случайного спуска)**

Алгоритм метода (на примере функции двух переменных):

- 1) Задается начальная точка  $X^0$  и начальное значение параметра  $r_0$ .
  - 2) Строится система пробных точек (обычно 5-8 точек):  $X^{пр(i)} = X^k + r_k \xi^i$ , здесь  $k$  - номер итерации,  $\xi^k$  - случайный вектор единичной длины,  $i$  - номер пробной точки.
- Построенные пробные точки оказываются лежащими на гиперсфере радиуса  $r_k$  (в случае двух переменных – на окружности радиуса  $r_k$ ).

Для каждой пробной точки вычисляется значение функции  $f(X^{пр(i)})$ .

№ точки	x	y	f(X)
1			
2			
.....			
8			

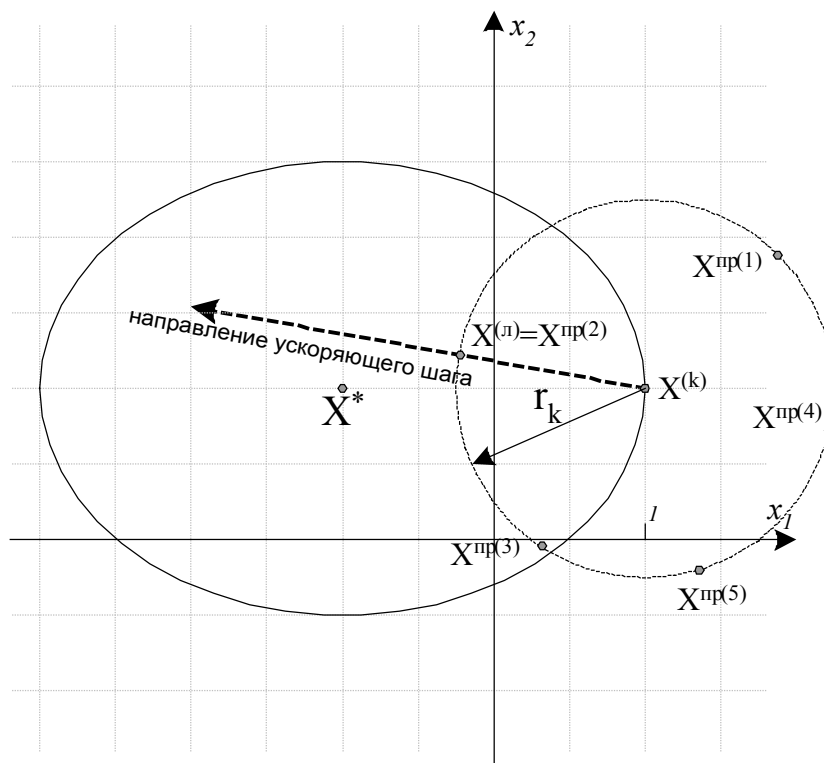
- 3) Из полученного набора выбирается наилучшая точка  $X^{(л)}$ , для которой  $f(X^{(л)}) = \min[f(X^{пр(i)})]$ . Выбор осуществляется пользователем.

- 4) Проверяется условие:  $f(X^{(л)}) < f(X^k)$ :

□ если условие выполнено, то система пробных точек считается удачной, далее возможно два продолжения алгоритма:

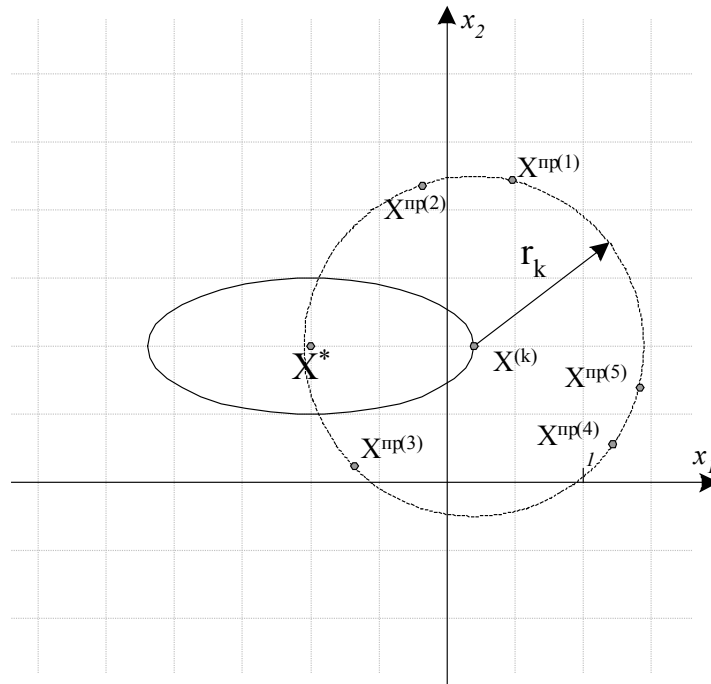
4.1)  $X^{k+1} = X^{(л)}$

- 4.2) в направлении, соединяющем точки  $X^k$  и  $X^{(л)}$  делается ускоряющий шаг:  $X^{k+1} = X^{(л)} + \lambda(X^{(л)} - X^k)$ , в этом случае, если оказывается, что  $f(X^{k+1}) \geq f(X^k)$ , принимается  $X^{k+1} = X^{(л)}$

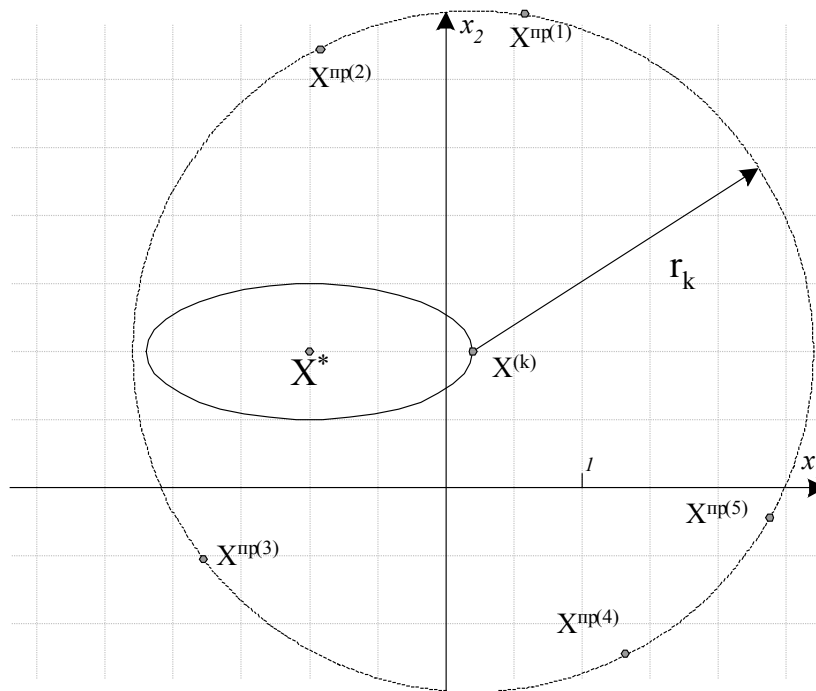


Удачная система пробных точек

- если условие не выполняется, делается попытка построить новую удачную систему пробных точек. Если при этом пробная окружность целиком покрывает текущую линию уровня, текущий радиус  $r_k$  должен быть уменьшен.



Неудачная система пробных точек (возможна повторная попытка)



Неудачная система пробных точек (необходимо уменьшить радиус)

5) Процедура 2)-4) повторяется до выполнения критерия окончания счета.

Основной критерий окончания метода:  $r_k \leq \varepsilon$

Начальные параметры метода:  $X^0$ ,  $\varepsilon$ , начальное значение радиуса  $r_0$ .

Изменяемый параметр метода: величина радиуса  $r_k$ .