ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

Занятие 1. НЕОБХОДИМЫЕ И ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Постановка задачи

Дана дважды непрерывно дифференцируемая функция $f(x)$, определенная на множестве $X = R^n$.

Требуется исследовать функцию $f(x)$ на экстремум, т.е. определить точки $x^* \in R^n$ ее локальных минимумов и максимумов на R^n:

$$f(x^*) = \min_{x \in R^n} f(x); \qquad f(x^*) = \max_{x \in R^n} f(x).$$

Схема исследования функций на безусловный экстремум

Необходимые условия экстремума первого порядка. *Пусть $x^* \in R^n$ есть точка локального минимума (максимума) функции $f(x)$ на множестве R^n и $f(x)$ дифференцируема в точке x^*. Тогда все частные производные функции $f(x)$ первого порядка в точке x^* равны нулю, т.е.*

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Точки x^*, удовлетворяющие необходимому условию, называются *стационарными.*

Рассмотрим определитель матрицы Гессе $H(x^*)$, вычисленной в стационарной точке $x*$: $\det H(x^*) = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nn} \end{vmatrix}$.

1. Определители $\Delta_1 = h_{11}$, $\Delta_2 = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{vmatrix}$,..., $\Delta_n = \begin{vmatrix} h_{11} & \cdots & h_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & \cdots & h_{nn} \end{vmatrix}$ называются *угловыми минорами*.

2. Определители m-го порядка ($m \le n$), получающиеся из определителя матрицы $H(x^*)$ вычеркиванием каких-либо ($n-m$) строк и ($n-m$) столбцов с одними и теми же номерами, называются *главными минорами.*

Первый способ проверки достаточных и необходимых условий второго порядка.

Критерий проверки достаточных условий экстремума (критерий Сильвестра).

Если знаки угловых миноров строго положительны:

$$\Delta_1 > 0, \quad \Delta_2 > 0, ..., \quad \Delta_n > 0,$$

то точка x^* является точкой локального минимума.

Если знаки угловых миноров чередуются, начиная с отрицательного:

$$\Delta_1 < 0, \ \Delta_2 > 0, \ \Delta_3 < 0, ..., \ (-1)^n \Delta_n > 0,$$

то точка x^* является точкой локального максимума.

Критерий проверки необходимых условий экстремума второго порядка

1. *Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно полуопределенной ($H(x^*) \ge 0$) и точка x^* может быть являлась точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы все главные миноры определителя матрицы Гессе были неотрицательны.*

2. *Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно полуопределенной ($H(x^*) \le 0$) и точка x^* может быть являлась точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы все главные миноры четного порядка были неотрицательны, а все главные миноры нечетного порядка – неположительны.*

Второй способ проверки достаточных и необходимых условий второго порядка (с помощью собственных значений матрицы Гессе).

Собственные значения λ_i, $i = 1,...,n$, матрицы $H(x^*)$ размеров $(n \times n)$ находятся как корни характеристического уравнения (алгебраического уравнения n-й степени):

$$\left| H(x^*) - \lambda E \right| = \begin{vmatrix} h_{11}-\lambda & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22}-\lambda & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \ldots & h_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0 .$$

Таблица

№ п/п	Второй способ	Тип стационарной точки x^*
1	$\lambda_1 > 0,...,\lambda_n > 0$	Локальный минимум
2	$\lambda_1 < 0,...,\lambda_n < 0$	Локальный максимум
3	$\lambda_1 \geq 0,...,\lambda_n \geq 0$	Может быть локальный минимум, требуется дополнительное исследование
4	$\lambda_1 \leq 0,...,\lambda_n \leq 0$	Может быть локальный максимум, требуется дополнительное исследование
5	$\lambda_1 = 0,...,\lambda_n = 0$	Требуется дополнительное исследование
6	λ_i имеют разные знаки	Нет экстремума

Пример 1. Найти экстремум функции $f(x) = -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 - x_1 + x_1 x_2 + 2x_3$ на множестве R^3.

☐ 1. Запишем необходимые условия экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = -2x_1 - 1 + x_2 = 0 ,$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_2} = -2x_2 + x_1 = 0 ,$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_3} = -2x_3 + 2 = 0 .$$

В результате решения системы получим стационарную точку $x^* = \left(-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, 1 \right)^T$.

2. Проверим выполнение достаточных условий экстремума.

Первый способ. Матрица Гессе имеет вид $H\left(x^*\right)=\begin{pmatrix}-2 & 1 & 0\\ 1 & -2 & 0\\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}$. Так как $\Delta_1=-2<0$, $\Delta_2=\begin{vmatrix}-2 & 1\\ 1 & -2\end{vmatrix}=4-1=3>0$, $\Delta_3=\left(-2\right)\cdot 3=-6<0$, т.е. знаки угловых миноров чередуются, начиная с отрицательного, то точка x^* – точка локального максимума.

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

$$\det\left(H-\lambda E\right)=\begin{vmatrix}-2-\lambda & 1 & 0\\ 1 & -2-\lambda & 0\\ 0 & 0 & -2-\lambda\end{vmatrix}=0.$$

Отсюда $\left(-2-\lambda\right)[(-2-\lambda)^2-1]=0$ и $\lambda_1=-2<0, \lambda_2=-1<0, \lambda_3=-3<0$. Так как все собственные значения матрицы Гессе отрицательны, то в точке x^* – локальный максимум.

3. Вычислим значение функции в точке локального максимума: $f(x^*)=\frac{4}{3}$.■

Пример 2. Найти экстремум функции $f(x)=x_1^3+x_2^2+x_3^2+x_2x_3-3x_1+6x_2+2$ на множестве R^3.

□ 1. Запишем необходимые условия экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}=3x_1^2-3=0,$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_2}=2x_2+x_3+6=0,$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_3}=2x_3+x_2=0.$$

В результате решения системы получим две стационарные точки:

$$x^{1*}=\left(1,\,-\,4,\,2\right)^T,\quad x^{2*}=\left(-1,\,-\,4,\,2\right)^T.$$

2. Проверим выполнение достаточных условий в каждой стационарной точке двумя способами. Составим матрицу Гессе $H(x)=\begin{pmatrix}6x_1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 1\\ 0 & 1 & 2\end{pmatrix}$.

Исследуем точку $x^{1*}=\left(1,\,-\,4,\,2\right)^T$.

Первый способ. Матрица Гессе имеет вид $H(x^{1*}) = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$. Так как $\Delta_1 = 6 > 0,\quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 12 > 0,\quad \Delta_3 = 18 > 0$, то точка x^{1*} является точкой локального минимума.

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

$$\begin{vmatrix} 6-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (6-\lambda)\left[(2-\lambda)^2 - 1 \right] = 0 .$$

Отсюда $\lambda_1 = 6 > 0, \lambda_2 = 3 > 0, \lambda_3 = 1 > 0$ и точка x^{1*} является точкой локального минимума.

Исследуем точку $x^{2*} = (-1,\ -\ 4,\ 2)^T$.

Первый способ. Матрица Гессе имеет вид $H(x^{2*}) = \begin{pmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$. Так как $\Delta_1 = -6 < 0,\quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = -12 < 0,\quad \Delta_3 = -18 < 0$, то достаточные условия экстремума не выполняются. Согласно схеме (см. рис.) проверим необходимые условия экстремума второго порядка. Главные миноры первого порядка $(m = 1)$ получаются из $\Delta_3 = \begin{vmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{vmatrix}$ в результате вычеркивания $n - m = 3 - 1 = 2$ строк и 2 столбцов с одинаковыми номерами: -6, 2, 2. Главные миноры второго порядка ($m = 2$) получаются из Δ_3 в результате вычеркивания $n - m = 3 - 2 = 1$ строк и столбцов с одинаковыми номерами: 3, –12, –12. Главный минор третьего порядка ($m = 3$) получается из Δ_3 в результате вычеркивания $n - m = 3 - 3 = 0$ строк и столбцов, т.е. совпадает с $\Delta_3 = -18$. Отсюда следует, что необходимые условия экстремума второго порядка не выполняются. Так как матрица Гессе не является нулевой, то можно сделать вывод о том, что в точке x^{2*} нет экстремума.

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

$$\begin{vmatrix} -6-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (-6-\lambda)\left[(2-\lambda)^2 - 1 \right] = 0 .$$

Отсюда $\lambda_1 = -\ 6 < 0, \lambda_2 = 3 > 0, \lambda_3 = 1 > 0$, т.е. собственные значения имеют разные знаки. Поэтому в точке x^{2*} нет экстремума.

3. Вычислим значение целевой функции в точке x^{1*} локального минимума: $f(x^{1*}) = -12$. ■

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА. МЕТОДЫ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Постановка задачи

Пусть дана функция $f(x)$, ограниченная снизу на множестве R^n и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти локальный минимум функции $f(x)$ на множестве допустимых решений $X = R^n$, т.е. найти такую точку $x^* \in R^n$, что

$$f(x^*) = \min_{x \in R^n} f(x).$$

А. МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА С ПОСТОЯННЫМ ШАГОМ

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0, $0 < \varepsilon < 1$, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций. Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = \left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \ldots, \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\| < \varepsilon_1$:

а) если критерий выполнен, расчет закончен, $x^* = x^k$;
б) если критерий не выполнен, то перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение неравенства $k \ge M$:

а) если неравенство выполнено, то расчет окончен: $x^* = x^k$;
б) если нет, то перейти к шагу 6.

Шаг 6. Задать величину шага t_k.

Шаг 7. Вычислить $x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия

$$f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) < 0 \quad \left(\text{или } f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) < -\varepsilon \left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\|^2 \right):$$

а) если условие выполнено, то перейти к шагу 9;

б) если условие не выполнено, положить $t_k = \dfrac{t_k}{2}$ и перейти к шагу 7.

Шаг 9. Проверить выполнение условий

$$\left\| x^{k+1} - x^k \right\| < \varepsilon_2, \quad \left| f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) \right| < \varepsilon_2:$$

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k - 1$, то расчет окончен, $x^* = x^{k+1}$;

б) если хотя бы одно из условий не выполнено, положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 3.

Геометрическая интерпретация метода для $n = 2$ приведена на рис. 1.

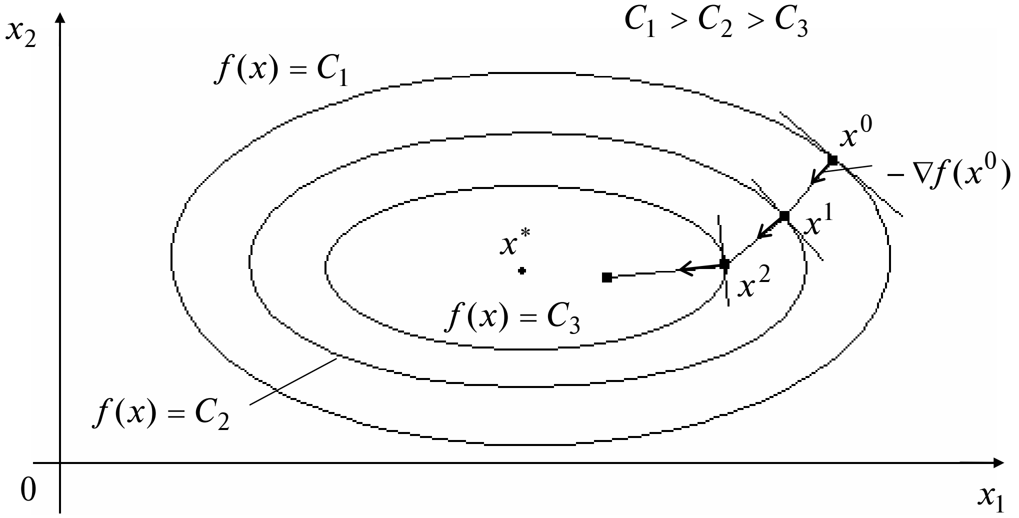

Рис. 1

Пример 1. Найти локальный минимум функции

$$f(x) = 2x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 .$$

□ I. Определим точку x^k, в которой выполнен по крайней мере один из критериев окончания расчетов.

1. Зададим x^0, ε_1, ε_2, M: $x^0 = (0{,}5;1)^T$, $\varepsilon_1 = 0{,}1$; $\varepsilon_2 = 0{,}15$; $M = 10$. Найдем градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$.

2. Положим $k = 0$.

3^0. Вычислим $\nabla f\left(x^0\right)$: $\nabla f\left(x^0\right) = (3; 2{,}5)^T$.

4^0. Вычислим $\left\| \nabla f\left(x^0\right) \right\|$: $\left\| \nabla f\left(x^0\right) \right\| = 3{,}9 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^0. Проверим условие $k \geq M$: $k = 0 < 10 = M$. Перейдем к шагу 6.

6^0. Зададим $t_0 = 0{,}5$.

7^0. Вычислим x^1: $x^1 = (0{,}5;1)^T - 0{,}5(3; 2{,}5)^T = (-1;-0{,}25)^T$; $f\left(x^1\right) = 2{,}31$.

8^0. Сравним $f\left(x^1\right)$ с $f\left(x^0\right) = 2$. Имеем $f\left(x^1\right) > f\left(x^0\right)$. Вывод: условие $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$ для $k = 0$ не выполняется. Зададим $t^0 = 0{,}25$, перейдем к повторению шагов 7, 8.

7^{01}. Вычислим x^1: $x^1 = (0{,}5;1)^T - 0{,}25(3; 2{,}5)^T = (-0{,}25; 0{,}375)^T$; $f\left(x^1\right) = 0{,}171$.

8^{01}. Сравним $f\left(x^1\right)$ и $f\left(x^0\right)$. Вывод: $f\left(x^1\right) < f\left(x^0\right)$. Перейдем к шагу 9.

9^0. Вычислим $\left\|x^1 - x^0\right\|$ и $\left|f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right)\right|$:

$$\left\|x^1 - x^0\right\| = 0{,}976 > 0{,}15; \quad \left|f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right)\right| = 1{,}829 > 0{,}15.$$

Вывод: положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Вычислим $\nabla f\left(x^1\right)$: $\nabla f\left(x^1\right) = \left(-0{,}625; 0{,}51\right)^T$.

4^1. Вычислим $\left\|\nabla f\left(x^1\right)\right\|$: $\left\|\nabla f\left(x^1\right)\right\| = 0{,}81 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^1. Проверим условие $k \geq M$: $k = 1 < 10 = M$. Перейдем к шагу 6.

6^1. Зададим $t_1 = 0{,}25$.

7^1. Вычислим x^2: $x^2 = \left(-0{,}25; 0{,}375\right)^T - 0{,}25\left(-0{,}625; 0{,}5\right)^T = \left(-0{,}094; 0{,}25\right)^T$; $f\left(x^2\right) = 0{,}056$.

8^1. Сравним $f\left(x^2\right)$ с $f\left(x^1\right)$. Вывод: $f\left(x^2\right) < f\left(x^1\right)$. Перейдем к шагу 9.

9^1. Вычислим $\left\|x^2 - x^1\right\|$ и $\left|f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right)\right|$:

$$\left\|x^2 - x^1\right\| = 0{,}2 > 0{,}15; \quad \left|f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right)\right| = 0{,}115 < 0{,}15.$$

Вывод: положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим $\nabla f\left(x^2\right)$: $\nabla f\left(x^2\right) = \left(-0{,}126; 0{,}406\right)^T$.

4^2. Вычислим $\left\|\nabla f\left(x^2\right)\right\|$: $\left\|\nabla f\left(x^2\right)\right\| = 0{,}425 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^2. Проверим условие $k \geq M$: $k = 2 < 10 = M$, перейдем к шагу 6.

6^2. Зададим $t_2 = 0{,}25$.

7^2. Вычислим x^3: $x^3 = \left(-0{,}094; 0{,}25\right)^T - 0{,}25\left(-0{,}126; 0{,}406\right)^T = \left(-0{,}063; 0{,}15\right)^T$; $f\left(x^3\right) = 0{,}021$.

8^2. Сравним $f\left(x^3\right)$ и $f\left(x^2\right)$. Вывод: $f\left(x^3\right) < f\left(x^2\right)$. Перейдем к шагу 9.

9^2. Вычислим $\left\|x^3 - x^2\right\|$ и $\left|f\left(x^3\right) - f\left(x^2\right)\right|$:

$$\left\|x^3 - x^2\right\| = 0{,}105 < 0{,}15; \quad \left|f\left(x^3\right) - f\left(x^2\right)\right| = 0{,}035 < 0{,}15.$$

Вывод: положим $k = 3$ и перейдем к шагу 3.

3^3. Вычислим $\nabla f\left(x^3\right)$: $\nabla f\left(x^3\right) = \left(-0{,}102; 0{,}237\right)^T$.

4^3. Вычислим $\left\|\nabla f\left(x^3\right)\right\|$: $\left\|\nabla f\left(x^3\right)\right\| = 0{,}257 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^3. Проверим условие $k \geq M$: $k = 3 < 10 = M$, перейдем к шагу 6.

6^3. Зададим $t_3 = 0{,}25$.

7^3. Вычислим x^4: $x^4 = (-0{,}063; 0{,}15)^T - 0{,}25(-0{,}102; 0{,}237)^T = (-0{,}038; 0{,}091)^T$; $f(x^4) = 0{,}0076$.

8^3. Сравним $f(x^4)$ и $f(x^3)$: $f(x^4) < f(x^3)$.

9^3. Вычислим $\|x^4 - x^3\|$, $|f(x^4) - f(x^3)|$:

$$\|x^4 - x^3\| = 0{,}064 < 0{,}15; \quad |f(x^4) - f(x^3)| = 0{,}015 < 0{,}15.$$

Условия $\|x^{k+1} - x^k\| < \varepsilon_2$, $|f(x^{k+1}) - f(x^k)| < \varepsilon_2$ выполнены при $k = 2{,}3$. Расчет окончен. Найдена точка $x^4 = (-0{,}038; 0{,}091)^T$; $f(x^4) = 0{,}0076$.

II. Проведем анализ точки x^4. Функция $f(x) = 2x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2$ является дважды дифференцируемой, поэтому проведем проверку достаточных условий минимума в точке x^4. Для этого проанализируем матрицу Гессе $H = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. Матрица является постоянной и положительно определенной (т.е. $H > 0$), так как оба ее угловых минора $\Delta_1 = 4$ и $\Delta_2 = 7$ положительны. Следовательно, точка $x^4 = (-0{,}038; 0{,}091)^T$ есть найденное приближение точки локального минимума $x^* = (0{,}0)^T$, а значение $f(x^4) = 0{,}0076$ есть найденное приближение значения $f(x^*) = 0$. ■

Б. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, предельное число итераций *M*. Найти градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\|\nabla f(x^k)\| < \varepsilon_1$:

а) если критерий выполнен, то $x^* = x^k$;
б) если критерий не выполнен, то перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение неравенства $k \ge M$:

а) если неравенство выполнено, то $x^* = x^k$;
б) если нет, то перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить величину шага t_k^* из условия

$$\varphi(t_k) = f\left(x^k - t_k \nabla f(x^k)\right) \to \min_{t_k}.$$

Шаг 7. Вычислить $x^{k+1} = x^k - t_k^* \nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{k+1} - x^k\right\| < \varepsilon_2, \quad \left|f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right)\right| < \varepsilon_2:$$

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k - 1$, то расчет окончен, $x^* = x^{k+1}$;

б) если хотя бы одно из условий не выполнено, то положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 3.

Геометрическая интерпретация метода для $n = 2$ приведена на рис. 2.

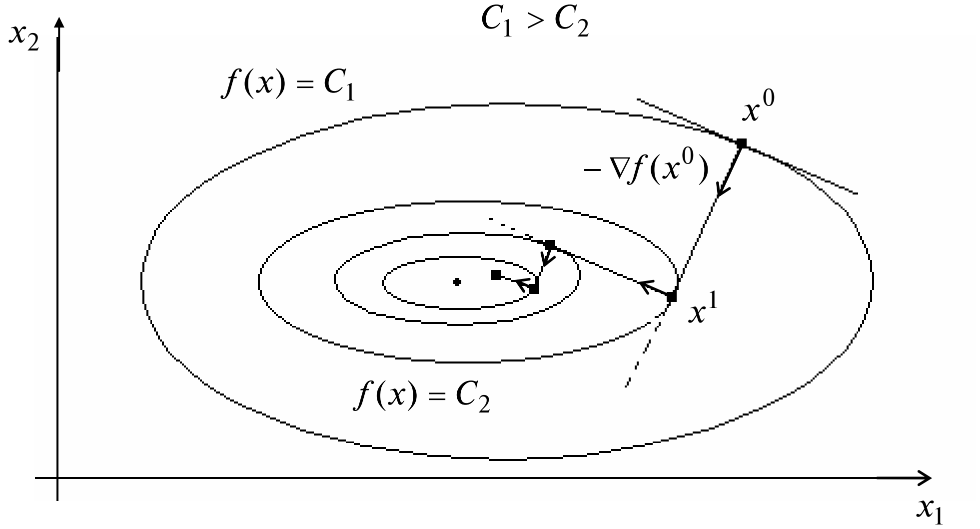

Рис. 2

Пример 2. Найти локальный минимум функции

$$f\left(x\right) = 2x_1{}^2 + x_1x_2 + x_2{}^2.$$

☐ I. Определим точку x^k, в которой выполнен по крайней мере один из критериев окончания расчетов.

1. Зададим x^0, ε_1, ε_2, M: $x^0 = \left(0{,}5;1\right)^T$; $\varepsilon_1 = 0{,}1$; $\varepsilon_2 = 0{,}15$; $M = 10$. Найдем градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$.

2. Положим $k = 0$.

3^0. Вычислим $\nabla f\left(x^0\right)$: $\nabla f\left(x^0\right) = \left(3; 2{,}5\right)^T$.

4^0. Вычислим $\left\|\nabla f\left(x^0\right)\right\|$: $\left\|\nabla f\left(x^0\right)\right\| = 3{,}9 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^0. Проверим условие $k \geq M$: $k = 0 < 10 = M$, перейдем к шагу 6.

6^0. Следующую точку найдем по формуле

$$x^1 = x^0 - t_0 \nabla f(x^0) = (0{,}5;\, 1)^T - t_0 (3;\, 2{,}5)^T = (0{,}5 - 3t_0;\, 1 - 2{,}5 \cdot t_0)^T.$$

Подставим полученные выражения $x_1^1 = 0{,}5 - 3t_0$, $x_2^1 = 1 - 2{,}5 \cdot t_0$ для координат в $f(x)$: $\varphi(t_0) = 2 \cdot (0{,}5 - 3t_0)^2 + (0{,}5 - 3t_0) \cdot (1 - 2{,}5 \cdot t_0) + (1 - 2{,}5 \cdot t_0)^2$. Найдем минимум функции $\varphi(t_0)$ по t_0 с помощью необходимых условий безусловного экстремума:

$$\frac{d\varphi(t_0)}{dt_0} = 4 \cdot (0{,}5 - 3t_0) \cdot (-3) + (-3) \cdot (1 - 2{,}5t_0) + (-2{,}5) \cdot (0{,}5 - 3t_0) + 2 \cdot (1 - 2{,}5 \cdot t_0) \cdot (-2{,}5) =$$

$= -15{,}25 + 63{,}25 \cdot t_0 = 0$. Отсюда $t_0^* \cong 0{,}24$. Так как $\dfrac{d^2\varphi(t_0)}{dt_0^2} = 63{,}25 > 0$, найденное значение шага обеспечивает минимум функции $\varphi(t_0)$ по t_0.

Заметим, что можно получить формулу для вычисления наилучшей величины шага t_k^* на любой итерации из условия

$$\varphi(t_k) = f\left(x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)\right) \to \min_{t_k}.$$

Имеем

$$\nabla f\left(x^k\right) = \left(4x_1^k + x_2^k; x_1^k + x_2^k\right)^T; x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right) = \left[x_1^k - t_k\left(4x_1^k + x_2^k\right); x_2^k - t_k\left(x_1^k + x_2^k\right)\right]^T,$$

$$\varphi(t_k) = 2\left(x_1^k - t_k(4x_1^k + x_2^k)\right)^2 + \left(x_1^k - t_k(4x_1^k + x_2^k)\right)\left(x_2^k - t_k(x_1^k + x_2^k)\right) +$$
$$+ \left(x_2^k - t_k(x_1^k + x_2^k)\right)^2.$$

Из условия $\dfrac{d\varphi}{dt_k} = 0$ получаем

$$t_k^* = \frac{\left(4x_1{}^k + x_2{}^k\right)^2 + \left(x_1{}^k + 2x_2{}^k\right)^2}{4\left(4x_1{}^k + x_2{}^k\right)^2 + 2\left(4x_1{}^k + x_2{}^k\right)\left(x_1{}^k + 2x_2{}^k\right) + 2\left(x_1{}^k + 2x_2{}^k\right)^2}.$$

Определим t_0^*: $t_0^* = 0{,}24$.

7^0. Найдем $x^1 = x^0 - t_0^* \nabla f\left(x^0\right)$: $x^1 = (0{,}5;1)^T - 0{,}24(3;2{,}5)^T = (-0{,}22;0{,}4)^T$.

8^0. Вычислим $\left\|x^1 - x^0\right\|$: $\left\|x^1 - x^0\right\| = 0{,}937 > 0{,}15$. Вычислим $\left|f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right)\right|$: $\left|f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right)\right| = 1{,}83 > 0{,}15$. Вывод: положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Вычислим $\nabla f\left(x^1\right)$: $\nabla f\left(x^1\right) = (-0{,}48;0{,}58)^T$.

4^1. Вычислим $\left\|\nabla f\left(x^1\right)\right\| = 0{,}752 > 0{,}1$.

5^1. Проверим условие $k \ge M$: $k = 1 < 10 = M$.

6^1. Определим t_1^*: $t_1^* = 0{,}546$ (см. п. 6^0).

7^1. Найдем $x^2 = x^1 - t_1^* \nabla f\left(x^1\right)$:

$$x^2 = (-0{,}22;0{,}4)^T - 0{,}546(-0{,}48;0{,}58)^T = (0{,}04;0{,}08)^T.$$

8^1. Вычислим $\left\|x^2 - x^1\right\|$, $\left|f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right)\right|$:

$$\left\|x^2 - x^1\right\| = 0{,}41 > 0{,}15; \quad \left|f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right)\right| = 0{,}156 > 0{,}15.$$

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим $\nabla f\left(x^2\right)$: $\nabla f\left(x^2\right) = (0{,}24; 0{,}2)^T$.

4^2. Вычислим $\left\| \nabla f\left(x^2\right) \right\|$: $\left\| \nabla f\left(x^2\right) \right\| = 0{,}312 > 0{,}1$.

5^2. Проверим условие $k \ge M$: $k = 2 < 10 = M$.

6^2. Определим t_2^*: $t_2^* = 0{,}24$ (см. п. 6^0).

7^2. Найдем $x^3 = x^2 - t_2^* \nabla f\left(x^2\right)$:

$$x^3 = (0{,}04; 0{,}08)^T - 0{,}24\,(0{,}24; 0{,}2)^T = (-0{,}0176; 0{,}032)^T.$$

8^2. Вычислим $\left\| x^3 - x^2 \right\|$, $\left| f\left(x^3\right) - f\left(x^2\right) \right|$:

$$\left\| x^3 - x^2 \right\| = 0{,}0749 < 0{,}15; \quad \left| f\left(x^3\right) - f\left(x^2\right) \right| = 0{,}0116 < 0{,}15.$$

Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 3.

3^3. Вычислим $\nabla f\left(x^3\right)$: $\nabla f\left(x^3\right) = (-0{,}012; -0{,}0816)^T$.

4^3. Вычислим $\left\| \nabla f\left(x^3\right) \right\|$: $\left\| \nabla f\left(x^3\right) \right\| = 0{,}082 < 0{,}1$. Расчет окончен. Найдена точка $x^3 = (-0{,}0176; 0{,}032)^T$, $f\left(x^3\right) = 0{,}00127$.

II. Проведем анализ точки x^3. В примере 1 было показано, что точка x^3 является найденным приближением точки минимума x^*. ■

В. МЕТОД ГАУССА–ЗЕЙДЕЛЯ

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^{00}, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$; предельное число M циклов счета, кратное n, где n – размерность вектора x. Найти градиент $\nabla f(x)$.

Шаг 2. Задать номер цикла $j = 0$.

Шаг 3. Проверить условие $j \ge M$:

а) если $j \ge M$, то расчет окончен и $x^* = x^{jk}$;

б) если $j < M$, то перейти к шагу 4.

Шаг 4. Задать $k = 0$.

Шаг 5. Проверить условие $k \le n - 1$:

а) если $k \le n - 1$, то перейти к шагу 6;

б) если $k = n$, то положить $j = j + 1$ и перейти к шагу 3.

Шаг 6. Вычислить $\nabla f\left(x^{jk}\right)$.

Шаг 7. Проверить выполнение условия $\left\| \nabla f\left(x^{jk}\right) \right\| < \varepsilon_1$:

а) если условие выполнено, то расчет окончен и $x^* = x^{jk}$;

б) если нет, то перейти к шагу 8.

Шаг 8. Вычислить t_k^* из условия

$$\varphi(t_k) = f\left(x^{jk} - t_k\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}\right) \to \min_{t_k}.$$

Шаг 9. Вычислить $x^{jk+1} = x^{jk} - t_k^*\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}$.

Шаг 10. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{jk+1} - x^{jk}\right\| < \varepsilon_2, \quad \left|f\left(x^{jk+1}\right) - f\left(x^{jk}\right)\right| < \varepsilon_2:$$

а) если оба условия выполнены в двух последовательных циклах с номерами j и $j-1$, то расчет окончен, найдена точка $x^* = x^{jk+1}$;

б) если не выполняется хотя бы одно условие, положить $k = k+1$ и перейти к шагу 5.

Геометрическая интерпретация метода для $n = 2$ приведена на рис. 3.

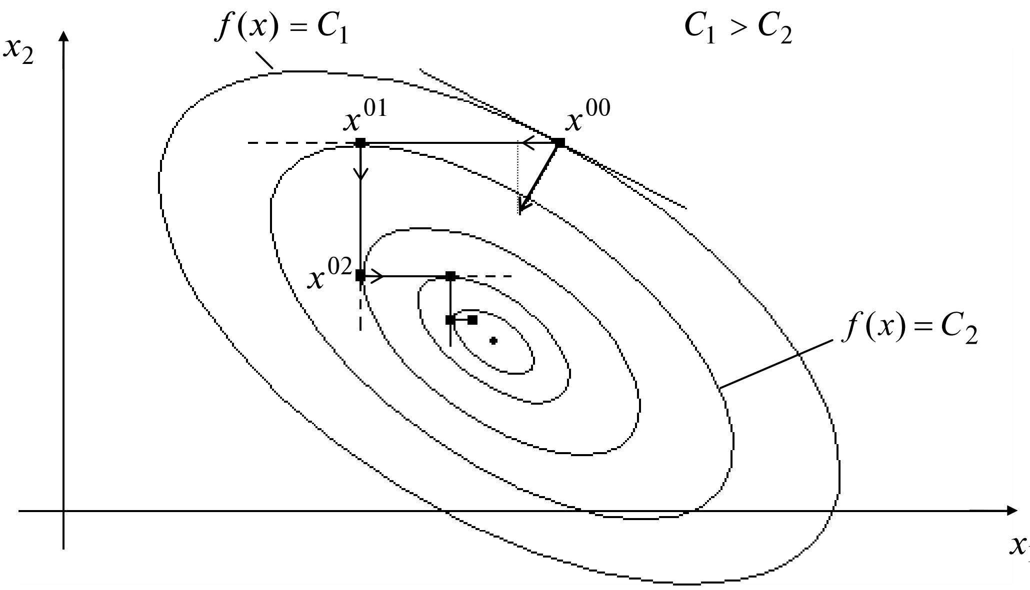

Рис. 3

Пример 3. Найти локальный минимум функции

$$f(x) = 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2.$$

□ I. Определим точку x^{jk}, в которой выполнен хотя бы один из критериев окончания расчетов.

1. Зададим $x^{00}, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^{00} = (0{,}5;1)^T$, $\varepsilon_1 = 0{,}1$; $\varepsilon_2 = 0{,}15$; $M = 10$. Найдем градиент функции в произвольной точке $\nabla f(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$.

2. Зададим $j = 0$.

3^0. Проверим выполнение условия $j \ge M$: $j = 0 < 10 = M$.

4^0. Зададим $k = 0$.

5^0. Проверим выполнение условия $k \le n-1$: $k = 0 < 1 = n-1$.

6^0. Вычислим $\nabla f\left(x^{00}\right)$: $\nabla f\left(x^{00}\right) = (3; 2{,}5)^T$.

7^0. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^{00}\right)\right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^{00}\right)\right\| = 3{,}9 > 0{,}1$.

8^0. Определим величину шага t_0^* из условия

$$\varphi(t_0) = f\left(x^{j0} - t_0 \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x = x^{j0}} \cdot e_1 \right) \to \min_{t_0}.$$

Воспользуемся формулой при $k = 0, j = 0$: $x^{01} = x^{00} - t_0 \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x = x^{00}} \cdot e_1$.

Поскольку $\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x = x^{00}} = 4x_1 + x_2 \Big|_{x = x^{00}} = 2 + 1 = 3$, $e_1 = (1;\, 0)^T$, то $x^{01} = (0{,}5;\, 1)^T - t_0 \cdot 3 \cdot (1;\, 0)^T = (0{,}5 - 3t_0;\, 1)^T$ или $x_1^{01} = 0{,}5 - 3t_0, x_2^{01} = 1$. Подставляя полученные выражения в $f(x)$, имеем $\varphi(t_0) = 2(0{,}5 - 3t_0)^2 + (0{,}5 - 3t_0) \cdot 1 + 1$.

Из необходимого условия экстремума $\frac{d\varphi(t_0)}{dt_0} = 4 \cdot (0{,}5 - 3t_0) \cdot (-3) - 3 = 0$ или $36t_0 - 9 = 0$ находим $t_0^* = \frac{1}{4}$. Так как $\frac{d^2\varphi(t_0)}{dt_0^{\,2}} = 36 > 0$, то найденное значение шага обеспечивает минимум функции $\varphi(t_0)$ по t_0.

Можно показать, что в силу структуры заданной функции $f(x)$ величина шага в направлении $-\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x = x^{jk}} \cdot e_1$ не зависит от x^k, является постоянной и равной $\frac{1}{4}$.

9^0. Определим $x^{01} = x^{00} - t_0^* \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x = x^{00}} \cdot e_1$: $x^{01} = (-0{,}25; 1)^T$.

10^0. Проверим условия $\left\| x^{01} - x^{00} \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^{01}\right) - f\left(x^{00}\right) \right| < \varepsilon_2$:

$$\left\| x^{01} - x^{00} \right\| = 0{,}25 > 0{,}15, \quad \left| f\left(x^{01}\right) - f\left(x^{00}\right) \right| = \left| \, 0{,}875 - 2 \, \right| = 1{,}125 > 0{,}15.$$

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 5.

5^1. Проверим условие $k \le n-1$: $k = 1 = n-1$.

6^1. Вычислим $\nabla f\left(x^{01}\right)$: $\nabla f\left(x^{01}\right) = (0; 1{,}75)^T$.

7^1. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^{01}\right)\right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^{01}\right)\right\| = 1{,}75 > 0{,}1$.

8^1. Определим величину шага t_1^* из условия

$$\varphi(t_1) = f\left(x^{j1} - t_1 \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_2}\right)_{x = x^{j1}} \cdot e_2 \right) \to \min_{t_1}.$$

Воспользуемся формулой при $k=1, j=0$: $x^{02}=x^{01}-t_1\left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{01}}\cdot e_2$.

Поскольку $\left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{01}}=x_1+2x_2\Big|_{x=x^{01}}=-0{,}25+2=1{,}75$, $e_2=(0;1)^T$, то

$x^{02}=(-0{,}25;1)^T-t_1\cdot 1{,}75\cdot(0;1)^T=(-0{,}25;1-1{,}75\cdot t_1)^T$ или $x_1^{02}=-0{,}25; x_2^{02}=1-1{,}75\cdot t_1$. Подставляя полученные выражения в $f(x)$, имеем

$$\varphi(t_1)=2(-0{,}25)^2+(-0{,}25)\cdot(1-1{,}75\cdot t_1)+(1-1{,}75\cdot t_1)^2.$$

Из необходимого условия экстремума

$\dfrac{d\varphi(t_1)}{dt_1}=0{,}25\cdot 1{,}75+2\cdot(1-1{,}75\cdot t_1)\cdot(-1{,}75)=0$ или $2\cdot 1{,}75^2 t_1-1{,}75^2=0$

находим $t_1^*=\dfrac{1}{2}$. Так как $\dfrac{d^2\varphi(t_1)}{dt_1{}^2}=2\cdot 1{,}75^2>0$, то найденное значение шага обеспечивает минимум функции $\varphi(t_1)$ по t_1.

Можно показать, что в силу структуры функции $f(x)$ величина шага в направлении $-\left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{jk}}\cdot e_2$ остается постоянной и равной $\dfrac{1}{2}$.

9^1. Вычислим $x^{02}=x^{01}-t_1^*\left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2}\right)_{x=x^{01}}\cdot e_2$: $x^{02}=(-0{,}25;0{,}125)^T$.

10^1. Проверим условия $\left\|x^{02}-x^{01}\right\|<\varepsilon_2$, $\left|f(x^{02})-f(x^{01})\right|<\varepsilon_2$:

$$\left\|x^{02}-x^{01}\right\|=0{,}875>0{,}15,\quad \left|f(x^{02})-f(x^{01})\right|=|\,0{,}12-0{,}875\,|=0{,}755>0{,}15.$$

Положим $k=2$ и перейдем к шагу 5.

5^2. Проверим условие $k\le n-1$: $k=2=n$. Положим $j=1, x^{10}=x^{02}$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Проверим условие $j\ge M$: $j=1<10=M$.

4^1. Зададим $k=0$.

5^3. Проверим условие $k\le n-1$: $k=0<1=n-1$.

6^3. Вычислим $\nabla f(x^{10})$: $\nabla f(x^{10})=\nabla f(x^{02})=(-0{,}875;0{,}00)^T$.

7^3. Проверим условие $\left\|\nabla f(x^{10})\right\|<\varepsilon_1$: $\left\|\nabla f(x^{10})\right\|=0{,}875>0{,}1$.

8^3. Полагаем $t_0^*=0{,}25$ (см. п. 8^0).

9^3. Вычислим $x^{11}=x^{10}-t_0^*\left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1}\right)_{x=x^{10}}\cdot e_1$: $x^{11}=(-0{,}03;0{,}125)^T$.

10^3. Проверим условия $\left\|x^{11}-x^{10}\right\|<\varepsilon_2$, $\left|f(x^{11})-f(x^{10})\right|<\varepsilon_2$:

$$\left\| x^{11} - x^{10} \right\| = 0{,}22 > 0{,}15\,, \quad \left| f\left(x^{11}\right) - f\left(x^{10}\right) \right| = |\,0{,}013 - 0{,}1375\,| = 0{,}124 < 0{,}15\,.$$

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 5.

5^4. Проверим условие $k \le n - 1$: $k = 1 = n - 1$.

6^4. Вычислим $\nabla f\left(x^{11}\right)$: $\nabla f\left(x^{11}\right) = (0{,}005; 0{,}22)^T$.

7^4. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^{11}\right) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^{11}\right) \right\| = 0{,}22 > 0{,}1$.

8^4. Зададим $t_1^* = 0{,}5$ (см. п. 8^1).

9^4. Вычислим $x^{12} = x^{11} - t_1^* \left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2} \right)_{x = x^{11}} \cdot e_2$: $x^{12} = (-0{,}03; 0{,}015)^T$.

10^4. Проверим условия $\left\| x^{12} - x^{11} \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^{12}\right) - f\left(x^{11}\right) \right| < \varepsilon_2$:

$$\left\| x^{12} - x^{11} \right\| = 0{,}11 < 0{,}15\,, \quad \left| f\left(x^{12}\right) - f\left(x^{11}\right) \right| = |\,0{,}0015 - 0{,}013\,| = 0{,}0115 < 0{,}15\,.$$

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 5.

5^5. Проверим условие $k \le n - 1$: $k = 2 = n$. Положим $j = 2$, $x^{20} = x^{12}$ и перейдем к шагу 3.

3^2. Проверим условие $j \ge M$: $j = 2 < 10 = M$.

4^2. Зададим $k = 0$.

5^6. Проверим условие $k \le n - 1$: $k = 0 < 1 = n - 1$.

6^5. Вычислим $\nabla f\left(x^{20}\right)$: $\nabla f\left(x^{20}\right) = (-0{,}105; 0)^T$.

7^5. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^{20}\right) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^{20}\right) \right\| = 0{,}105 > \varepsilon_1$.

8^5. Зададим $t_0^* = 0{,}25$ (см. п. 8^0).

9^5. Вычислим $x^{21} = x^{20} - t_0^* \left(\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1} \right)_{x = x^{20}} \cdot e_1$: $x^{21} = (-0{,}004; 0{,}015)^T$.

10^5. Проверим условия $\left\| x^{21} - x^{20} \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^{21}\right) - f\left(x^{20}\right) \right| < \varepsilon_2$:

$$\left\| x^{21} - x^{20} \right\| = 0{,}026 < 0{,}15\,, \quad \left| f\left(x^{21}\right) - f\left(x^{20}\right) \right| = |\,0{,}000197 - 0{,}0015\,| = 0{,}0013 < 0{,}15\,.$$

Условия $\left\| x^{jk+1} - x^{jk} \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^{jk+1}\right) - f\left(x^{jk}\right) \right| < \varepsilon_2$ выполнены в двух последовательных циклах с номерами $j = 2$ и $j - 1 = 1$. Расчет окончен, найдена точка $x^{21} = (-0{,}004; 0{,}015)^T$; $f\left(x^{21}\right) = 0{,}000197$. Получены точки последовательности $x^{00} \to x^{01} \to x^{02} = x^{10} \to x^{11} \to x^{12} = x^{20} \to x^{21}$.

II. Проведем анализ точки x^{21}. Точка x^{21} является найденным приближением точки минимума $f(x)$ (см. пример 1). ■