Занятие 2. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА. МЕТОДЫ ПЕРВОГО И ВТОРОГО ПОРЯДКА (*продолжение занятия* 1)

Г. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА–РИВСА

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

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

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций. Найти градиент $\nabla f(x)$.

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 выполняется, то расчет окончен и $x^* = x^k$;
б) если нет, то перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить условие $k \ge M$:

а) если неравенство выполняется, то расчет окончен и $x^* = x^k$;
б) если нет, то при $k = 0$ перейти к шагу 6, а при $k \ge 1$ перейти к шагу 7.

Шаг 6. Определить $d^0 = -\nabla f\left(x^0\right)$.

Шаг 7. Определить

$$\beta_{k-1} = \frac{\left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\|^2}{\left\| \nabla f\left(x^{k-1}\right) \right\|^2}, \qquad \left[\beta_{k-1} = \begin{cases} \dfrac{\left(\nabla f\left(x^k\right), \left[\nabla f\left(x^k\right) - \nabla f\left(x^{k-1}\right) \right] \right)}{\left\| \nabla f\left(x^{k-1}\right) \right\|^2}, & k \notin J \\ 0, \quad k \in J \end{cases} \right].$$

Шаг 8. Определить $d^k = -\nabla f\left(x^k\right) + \beta_{k-1} d^{k-1}$.

Шаг 9. Найти t_k^* из условия $\varphi(t_k) = f\left(x^k + t_k d^k\right) \to \min\limits_{t_k}$.

Шаг 10. Вычислить $x^{k+1} = x^k + t_k^* d^k$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий

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

а) в случае выполнения обоих условий в двух последовательных итерациях с номерами k и $k-1$ расчет окончен, найдена точка $x^* = x^{k+1}$;

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

Геометрическая интерпретация метода для $n = 2$ изображена на рис. 4.

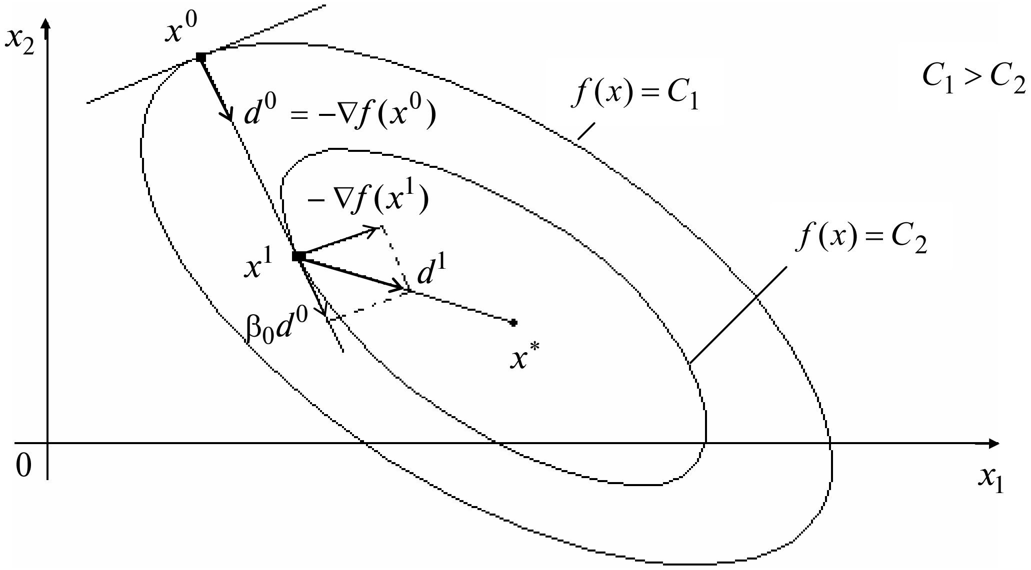

Рис. 4

Пример 4. 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 $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0{,}5;1)^T$, $\varepsilon_1 = 0{,}1; \varepsilon_2 = 0{,}15; M = 10$. 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. Проверим условие $\left\|\nabla f\left(x^0\right)\right\| < \varepsilon_1$: $\left\|\nabla f\left(x^0\right)\right\| = 3{,}9 > 0{,}1$.

5^0. Проверим условие $k \geq M$: $k = 0 < 10 = M$.

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

9^0. Определим t_0^* из условия $f\left(x^0 + t_0\, d^0\right) \to \min\limits_{t_0}$: $t_0^* = 0{,}24$ (см. пример 2, так как первая итерация выполняется по методу наискорейшего спуска).

10^0. Вычислим $x^1 = x^0 + t_0^*\, d^0$: $x^1 = (-0{,}22; 0{,}4)^T$.

11^0. Проверим условия $\left\|x^1 - x^0\right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right)\right| < \varepsilon_2$:

$$\left\|x^1 - x^0\right\| = 0{,}937 > 0{,}15; \qquad \left| f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right) \right| = |\,0{,}17 - 2\,| = 1{,}83 > 0{,}15.$$

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. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| = 0{,}752 > 0{,}1$.

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

7^1. Определим $\beta_0 = \dfrac{\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\|^2}{\left\| \nabla f\left(x^0\right) \right\|^2}$: $\beta_0 = 0{,}0373$.

8^1. Определим $d^1 = -\nabla f\left(x^1\right) + \beta_0 d^0$:

$$d^1 = -(-0{,}48; 0{,}58)^T - 0{,}0373\,(3; 2{,}5)^T = (0{,}368; -0{,}673)^T.$$

9^1. Определим t_1^* из условия $f\left(x^1 + t_1 d^1\right) \to \min\limits_{t_1}$. Воспользуемся формулой $x^2 = x^1 + t_1 d^1 = (-0{,}22; 0{,}4)^T + t_1 (0{,}368; -0{,}673)^T = (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1; 0{,}4 - 0{,}673\, t_1)^T$.

Подставляя полученное выражение в $f(x)$, имеем

$$\varphi(t_1) = 2 \cdot (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1)^2 + (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1) \cdot (0{,}4 - 0{,}673\, t_1) + (0{,}4 - 0{,}673\, t_1)^2.$$

Применяя необходимое условие безусловного экстремума

$$\frac{d\varphi(t_1)}{dt_1} = 4 \cdot (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1) \cdot 0{,}368 + 0{,}368 \cdot (0{,}4 - 0{,}673\, t_1) +$$

$$+ (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1) \cdot (-0{,}673) + 2 \cdot (0{,}4 - 0{,}673\, t_1) \cdot (-0{,}673) = 0,$$

находим $t_1^* \cong 0{,}595$. Поскольку $\dfrac{d^2\varphi(t_1)}{dt_1^2} = 0{,}952226 > 0$, найденное значение шага обеспечивает минимум функции $\varphi(t_1)$ по t_1.

10^1. Вычислим $x^2 = x^1 + t_1^* d^1$: $x^2 = (0{,}0010; 0{,}000)^T$.

11^1. Проверим условия $\left\|x^2 - x^1\right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right) \right| < \varepsilon_2$:

$$\left\|x^2 - x^1\right\| = 0{,}456 > 0{,}15; \qquad \left| f\left(x^2\right) - f\left(x^1\right) \right| = 0{,}17 > 0{,}15.$$

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим $\nabla f\left(x^2\right)$: $\nabla f\left(x^2\right) = (0{,}003; 0{,}006)^T$.

4^2. Проверим условие $\left\|\nabla f\left(x^2\right)\right\| < \varepsilon_1$: $\left\|\nabla f\left(x^2\right)\right\| = 0{,}0067 < 0{,}1$. Расчет окончен. Найдена точка $x^2 = (0{,}001; 0)^T$; $f\left(x^2\right) = 2 \cdot 10^{-6}$.

II. Проведем анализ точки x^2. Функция $f(x) = 2x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2$ есть квадратичная функция двух переменных, имеющая положительно определенную матрицу вторых производных $H = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$. Это позволяет сделать вывод, что функция $f(x)$ имеет единственный минимум, приближение которого $x^2 = (0{,}001; 0)^T$ найдено за две итерации. ■

МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

А. МЕТОД НЬЮТОНА

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций. Найти градиент $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x)$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

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

а) если неравенство выполнено, то расчет окончен и $x^* = x^k$;
б) в противном случае перейти к шагу 5.

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

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

Шаг 6. Вычислить элементы матрицы $H(x^k)$.

Шаг 7. Найти обратную матрицу $H^{-1}(x^k)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия $H^{-1}(x^k) > 0$:

а) если $H^{-1}(x^k) > 0$, то перейти к шагу 9;

б) если нет, то перейти к шагу 10, положив $d^k = -\nabla f(x^k)$.

Шаг 9. Определить $d^k = -H^{-1}(x^k) \nabla f(x^k)$.

Шаг 10. Найти точку $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$,

положив $t_k = 1$, если $d^k = -H^{-1}(x^k) \nabla f(x^k)$,

или выбрав t_k из условия $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, если $d^k = -\nabla f(x^k)$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий

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

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k - 1$, то расчет окончен, $x^* = x^{k+1}$;
б) в противном случае положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 3.

Пример 5. Найти локальный минимум функции

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

□ I. Определим точку x^k, в которой выполняется по крайней мере один критерий окончания расчетов.

1. Зададим $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0{,}5;1)^T$; $\varepsilon_1 = 0{,}1$; $\varepsilon_2 = 0{,}15$; $M = 10$. Найдем градиент функции $\nabla f(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$ и матрицу Гессе $H(x) = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

2. Положим $k = 0$.

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

4^0. Проверим выполнение условия $\| \nabla f(x^0) \| \le \varepsilon_1$: $\| \nabla f(x^0) \| = 3{,}9 > 0{,}1$. Перейдем к шагу 5.

5^0. Проверим выполнение условия $k \ge M$: $k = 0 < 10$. Перейдем к шагу 6.

6^0. Вычислим $H(x^0)$: $H(x^0) = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

7^0. Вычислим $H^{-1}(x^0)$: $\quad H^{-1}(x^0) = \begin{pmatrix} \frac{2}{7} & -\frac{1}{7} \\ -\frac{1}{7} & \frac{4}{7} \end{pmatrix}$.

8^0. Проверим выполнение условия $H^{-1}(x^0) > 0$. Так как $\Delta_1 = \frac{2}{7} > 0$, $\Delta_2 = \frac{1}{7} > 0$, то согласно критерию Сильвестра $H^{-1}(x^0) > 0$.

9^0. Определим $d_0 = -H^{-1}(x^0)\nabla f(x^0) = -\begin{pmatrix} \frac{2}{7} & -\frac{1}{7} \\ -\frac{1}{7} & \frac{4}{7} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 2{,}5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -1 \end{pmatrix}$.

10^0. Вычислим $x^1 = \left(\frac{1}{2}, 1\right)^T + \left(-\frac{1}{2}, -1\right)^T = (0,0)^T$.

11^0. Проверим выполнение условий $\| x^1 - x^0 \| < \varepsilon_2$, $\left| f(x^1) - f(x^0) \right| < \varepsilon_2$:
$\| x^1 - x^0 \| = 1{,}12 > 0{,}15$; $\left| f(x^1) - f(x^0) \right| = 2 > 0{,}15$. Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Вычислим $\nabla f(x^1)$: $\nabla f(x^1) = (0,0)^T$.

4^1. Проверим выполнение условия $\| \nabla f(x^1) \| < \varepsilon_1$: $\| \nabla f(x^1) \| = 0 < 0{,}1$. Расчет окончен. Заметим, что в точке x^1 выполняется необходимое условие первого порядка, поэтому она является стационарной точкой.

II. Проведем анализ точки x^1. Для функции $f(x) = 2x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2$ матрица вторых производных $H = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} > 0$ в силу того, что $\Delta_1 = 4 > 0$, $\Delta_2 = 7 > 0$. Поэтому точка $x^1 = (0,0)^T$ есть точка локального минимума целевой функции $f(x)$. ■

Б. МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА

Алгоритм

Шаг 1. Задать x^0, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций. Найти градиент $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x)$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

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

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\| \le \varepsilon_1$:

а) если неравенство выполнено, то расчет закончен и $x^* = x^k$;
б) если нет, перейти к шагу 5.

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

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

Шаг 6. Вычислить элементы матрицы $H\left(x^k\right)$.

Шаг 7. Найти обратную матрицу $H^{-1}\left(x^k\right)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия $H^{-1}\left(x^k\right) > 0$:

а) если условие выполняется, то найти $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$;

б) если нет, то положить $d^k = -\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 9. Определить $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$.

Шаг 10. Найти шаг t_k^* из условия $\varphi(t_k) = f\left(x^k + t_k\, d^k\right) \to \min\limits_{t_k}$.

Шаг 11. Вычислить $x^{k+1} = x^k + t_k^*\, d^k$.

Шаг 12. Проверить выполнение неравенств

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

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k - 1$, то расчет окончен и $x^* = x^{k+1}$;
б) в противном случае положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 3.

Пример 6. Найти локальный минимум функции $f(x) = 2x_1{}^2 + x_1x_2 + x_2{}^2$.

□ I. Определим точку x^k, в которой выполняется по крайней мере один критерий окончания расчетов.

1. Зададим $x^0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, M$: $x^0 = (0{,}5;1)^T$, $\varepsilon_1 = 0{,}1$; $\varepsilon_2 = 0{,}15$; $M = 10$. Найдем градиент функции $\nabla f(x) = (4x_1 + x_2; x_1 + 2x_2)^T$ и матрицу Гессе $H(x) = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

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. Проверим выполнение условия $\left\| \nabla f\left(x^0\right) \right\| \le \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^0\right) \right\| = 3{,}9 > 0{,}1$.

5^0. Проверим выполнение условия $k \ge M$: $k = 0 < 10$. Перейдем к шагу 6.

6^0. Вычислим $H\left(x^0\right)$: $H\left(x^0\right) = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$.

7^0. Вычислим $H^{-1}\left(x^0\right)$: $\quad H^{-1}\left(x^0\right) = \begin{pmatrix} \frac{2}{7} & -\frac{1}{7} \\ -\frac{1}{7} & \frac{4}{7} \end{pmatrix}$.

8^0. Проверим выполнение условия $H^{-1}\left(x^0\right) > 0$.

Так как $\Delta_1 = \frac{2}{7} > 0,\ \Delta_2 = \frac{1}{7} > 0$, то согласно критерию Сильвестра $H^{-1}\left(x^0\right) > 0$. Поэтому найдем $d^0 = -H^{-1}\left(x^0\right)\nabla f\left(x^0\right)$: $d^0 = \left(-\frac{1}{2}, -1\right)^T$ (см. шаг 9^0 примера 5).

9^0. Определим: $x^1 = x^0 + t_0 d^0 = \left(\frac{1}{2}, 1\right)^T + t_0\left(-\frac{1}{2}, -1\right)^T = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}t_0, 1 - t_0\right)^T$.

10^0. Определим t_0^* из условия $\varphi(t_0) = f(x^0 + t_0 d^0) \to \min\limits_{t_0}$. Получим

$$f(x^0 + t_0 d^0) = f\left(\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}t_0, 1 - t_0\right)^T\right) =$$

$$= 2 \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}t_0\right)^2 + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}t_0\right) \cdot (1 - t_0) + (1 - t_0)^2 = 2 \cdot (1 - t_0)^2 = \varphi(t_0).$$

Из условия $\frac{d\varphi}{dt_0} = 2 \cdot 2 \cdot (1 - t_0) \cdot (-1) = 0$ находим $t_0^* = 1$. При этом $\frac{d^2\varphi}{d\,t_0^2} = 4 > 0$, т.е. найденная величина шага обеспечивает минимум функции $\varphi(t_0)$.

11^0. Вычислим $x^1 = x^0 + t_0^* d^0$: $\quad x^1 = \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot 1,\ 1 - 1\right)^T = (0,\ 0)^T$.

12^0. Проверим выполнение условий $\left\| x^1 - x^0 \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right) \right| < \varepsilon_2$:

$$\left\| x^1 - x^0 \right\| = 1{,}12 > 0{,}15; \quad \left| f\left(x^1\right) - f\left(x^0\right) \right| = 2 > 0{,}15.$$

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Вычислим $\nabla f\left(x^1\right)$: $\nabla f\left(x^1\right) = (0;0)^T$.

4^1. Проверим выполнение условия $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| = 0 < 0{,}1$. Расчет окончен: $x^* = x^1$.

II. Проведем анализ точки x^1. Точка $x^* = (0;0)^T$ – точка локального и одновременно глобального минимума $f(x)$ (см. пример 5). ■