Б. Банди

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

ВВОДНЫЙ КУРС

Перевод с английского О. В. Шихеевой
под редакцией В. А. Волынского

Москва «РАДИО И СВЯЗЬ»
1988

BASIC OPTIMISATION METHODS

Brian D. Bunday,
B.Sc., Ph.D., F.S.S., F.I.M.A.

*School of Mathematical Sciences,
University of Bradford*

Edward Arnold

ББК 32.81
Б 23
УДК 517.977.5

Редакция переводной литературы

Банди Б.

Б 23 Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.: ил.

ISBN 5-256-00052-7.

В книге английского автора изложена теория и описаны алгоритмы оптимизации непрерывных дифференцируемых функций при наличии ограничений и без них. Приведены тексты программ, реализующих приведенные алгоритмы на языке Бейсик. Предложено большое число примеров использования методов оптимизации при решении различных задач.

Для инженерно-технических работников, связанных с решением задач поиска оптимальных решений.

Б $\frac{1502000000-017}{046(01)-88}$ 49-88 ББК 32.81

ISBN 5-256-00052-7 (рус.)
ISBN 0-7131-3506-9 (англ.)

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

В последние годы вышло несколько книг по нелинейному программированию, однако книга Б. Банди "Методы оптимизации" занимает среди них особое место.

Каждая книга имеет своего читателя. Книга Б. Банди ориентирована на тех, кто хочет использовать методы оптимизации как инструмент решения конкретных прикладных задач, но не имеет практически никаких знаний в области нелинейного программирования. Все, что нужно для тех, кто хочет воспользоваться книгой Б. Банди, – это иметь представление о функциях n переменных и быть знакомыми с языком Бейсик. Для такого круга читателей книга дает четкое и лаконичное представление о подходе к решению задач оптимизации с ограничениями и без ограничений. Кроме того, в ней можно найти подробное описание алгоритмов (и их математическое обоснование) небольшого числа ставших уже классическими методов нелинейного программирования. Пожалуй, основной "изюминкой" книги является именно триада математический вывод – алгоритм – программа. Все описанные методы проиллюстрированы большим числом примеров, что делает изложение живым и легко усваиваемым.

В настоящее время, когда в нашей стране все шире распространяются персональные ЭВМ, на которых реализован язык Бейсик, к программам, написанным на этом языке, проявляется большой интерес. Поэтому приведенные в книге программы станут существенным подспорьем как при решении практических задач, так и в учебном процессе.

В книгу Б. Банди вошли далеко не все алгоритмы оптимизации. Для тех, кто стремится расширить число используемых алгоритмов, ниже приведен дополнительный список литературы. В работах [Д1–Д2] можно найти более детальное и математически полное описание теории оптимизации, в книге [Д3] основное внимание уделено вопросам оптимизации при наличии ограничений. В работах [Д4–Д6] изложены алгоритмы и приведены тексты программ на Фортране, реализующие различные методы условной и безусловной оптимизации. Кроме того, в работах [Д4–Д6] приведены сравнительные характеристики методов и результаты решения большого числа задач. В этих работах можно также найти подробное обсуждение критериев завершения в методах оптимизации, чему в книге Б. Банди не уделяется достаточного внимания.

Приведенные в книге тексты программ были проверены на 8-разрядной ЭВМ IBM PC XT, работающей под управлением операционной системы MS DOS. Полученные результаты несколько отличаются от приведенных автором в книге, однако отличия незначительны и не влияют на логику изложения. Операторы и их нумерация приведены в том же виде, в каком они даны автором. Однако для вывода на печать соответствующие операторы PRINT следует заменить на операторы вывода на печать (в нашем случае на LPRINT). При решении примера 2 в разд. 4.1 в программе изменены константы: в строке 800 – 0.0005: в строке 1100 – 0.0001. В программе, реализующей комплексный метод, датчик случайных чисел, используемый автором, существенно отличается от датчика случайных чисел, имеющегося в программном обеспечении IBM PC XT, поэтому значительное расхождение есть и в результатах решения. В примере 1 разд. 6.2 приведены для сравнения результаты, полученные автором, и результаты, полученные на IBM PC XT.

Практическая направленность, лаконизм изложения и большое число удачно подобранных примеров, безусловно, сделают книгу полезной специалистам различных областей, студентам старших курсов и аспирантам.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЙ СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Д1. **Сухарев А. Г., Тимохов А. В., Федоров В. В.** Курс методов оптимизации. – М.: Наука, 1986. – 328 с.

Д2. **Поляк Б. Т.** Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983. – 384 с.

Д3. **Численные** методы условий оптимизации. Пер. с англ./Под. ред. Ф. Гилла и У. Мюррея. – М.: Мир, 1977. – 290 с.

Д4. **Базара М., Шетти К.** Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 583 с.

Д5. **Химмельблау Д.** Прикладное нелинейное программирование: Пер. с англ. – М.: Мир, 1975. – 534 с.

Д6. **Гуснин С. Ю., Омельянов Г. А., Резников Г. А., Сироткин В. С.** Минимизация в инженерных расчетах на ЭВМ. – М.: Машиностроение, 1981. – 121 с.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящая книга предназначена для тех, кто имеет представление о функциях n переменных и знаком с языком программирования Бейсик. Основной упор сделан на осмысление того, как преобразовать теоретическую идею в практическую вычислительную процедуру. Хотя все рассмотренные в книге методы оптимизации пригодны для практического применения, основное внимание было уделено не математической строгости доказательств, а главной цели – созданию алгоритмов, предназначенных для реализации на микро-ЭВМ.

Мы надеемся, что читатель приложит серьезные усилия к тому, чтобы разобраться с приведенными программами. Не будем, однако, утверждать, что их нельзя улучшить. Пытаясь это сделать, читатель получит более глубокое представление об идеях, лежащих в основе методов оптимизации практических задач, которые должны быть решены в реальной ситуации.

Не все возможные методы оптимизации рассмотрены в этой книге, однако мы думаем, что те, которые были нами выбраны, охватывают наиболее важные идеи, лежащие в основе оптимизации. Остается еще много нерешенных вопросов, и мы надеемся, что некоторые читатели, прочтя эту книгу, захотят внести собственный вклад в улучшение методологии изучения методов оптимизации.

Несколько замечаний по поводу языка Бейсик и его использования в этой книге. Программы были написаны так, чтобы их выполнение на любой микро-ЭВМ вызывало минимум затруднений.

В операторах присваивания слово LET было опущено. Для некоторых машин наличие этого слова обязательно, и тогда его необходимо вводить в программы. В операторы IF . . . THEN GOTO было включено ключевое слово THEN, хотя для некоторых машин возможно отсутствие либо слова THEN, либо оператора GOTO. Не использовались конструкции IF . . . THEN . . . . . . ELSE, а также возможности конструкции REPEAT . . . UNTIL . . . , поскольку они не всегда доступны. Предполагалось, что массивы нумеруются с нулевого элемента. Поэтому для машин, где нумерация массивов начинается с 1, необходимо внести некоторые изменения. Например, один из надежных способов заключается в увеличении всех индексов, включая индексы в операторе DIM, на 1. Таким образом, оператор DIM A(M) превращается в оператор DIM A(M + 1), а оператор B(K, L) – в оператор B(K + 1, L + 1). Однако в конкретных случаях читатель может найти более изящные способы модификации. Приведенные в книге численные результаты получены на ЭВМ PET. В случае использования других машин, в памяти которых числа представляются с иной точностью, полученные результаты не будут точно совпадать с приведенными в книге, хотя отличие будет только в последних значащих цифрах.

В заключение хотелось бы поблагодарить миссис Валери Хантер, превратившую довольно беспорядочную рукопись в аккуратно перепечатанный текст.

Брайан Банди, 1984

ВВЕДЕНИЕ

В книге рассмотрены методы поиска оптимальных значений максимума или минимума функции n действительных переменных $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Если функция выражает прибыль, получаемую при производстве товаров x_i в количестве P_i, то мы будем стремиться максимизировать функцию. Если, с другой стороны, она выражает цену товара, участвующего в обороте, то мы будем стремиться минимизировать функцию. С математической точки зрения не играет существенной роли, рассматривать максимизацию или минимизацию, поскольку максимизация f эквивалентна минимизации $-f$. Мы ограничимся рассмотрением минимизации.

Значения переменных могут подчиняться ограничениям или изменяться без ограничений. Если, например, они действительно выражают количество определенных производимых продуктов, то при этом будет существовать ограничение на производственную мощность и ограничение на количество товара, которое может поглотить рынок. Таким образом, любое решение оптимизационной задачи должно учитывать эти ограничения. Для удобства в ч. I рассмотрены задачи, в которых на переменные не наложены ограничения, а в ч. II рассмотрены задачи, в которых на переменные наложены ограничения.

В любой практической оптимизационной задаче существует много совпадающих этапов. Наиболее важным этапом является моделирование рассматриваемой физической ситуации с целью получения математической функции, которую необходимо минимизировать, а также определения ограничений, если таковые существуют. Затем следует выбрать подходящую процедуру для осуществления минимизации. Эта процедура должна быть реализована на практике, что во многих реальных случаях вынуждает использовать ЭВМ для выполнения большого объема вычислений. И наконец, математический результат должен быть интерпретирован опять же в терминах физического содержания задачи.

Хотя ни одним из этих этапов нельзя пренебречь, основной упор в настоящей книге сделан на изучение процедур, предназначенных для осуществления минимизации, и возможностей их преобразования в такие вычислительные процедуры, которые можно выполнить на ЭВМ.

Не случайно, что многие важные методы оптимизации были разработаны в течение трех последних десятилетий, в период появления цифровых ЭВМ, и эти методы являются машинными. Трудно считать их сколько-нибудь практически значимыми без большой скорости и эффективности вычислительных машин, имеющихся в нашем распоряжении. На многих универсальных ЭВМ имеются пакеты программ оптимизации, реализующие эти методы. Они могут оказаться весьма эффективными и позволят решить широкий круг задач. При этом они могут быть достаточно самостоятельными и использоваться без оценки того, что происходит в действительности. Для большинства методов, рассматриваемых в этой книге (причем не исчерпывающих список существующих методов), приведены программы на языке Бейсик. Дано подробное объяснение процесса создания этих программ, что позволяет по-новому взглянуть на применимость методов оптимизации.

В течение многих лет программы опробовались в Университете г. Брадфорд. Однако автор не утверждает, что они являются верхом изящества и эффективности. По мере того как читатель будет становиться более эрудированным, он сможет попробовать вносить улучшения в программы, и автору было бы интересно узнать точку зрения читателей по этому вопросу. Программы могут выполняться на большинстве микроЭВМ, использующих язык Бейсик или программное обеспечение фирмы Computer Microsoft. Все программы были опробованы на ЭВМ PET и Tandy (TRS80). Несложно будет "перевести" эти программы на другие языки, такие как Фортран или Алгол, чтобы они могли выполняться и на универсальных машинах.

ЧАСТЬ I

ОПТИМИЗАЦИЯ БЕЗ ОГРАНИЧЕНИЙ

ГЛАВА 1. КЛАССИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

1.1. ФУНКЦИИ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Функция $f(x)$ имеет локальный минимум в точке x_0, если существует некоторая положительная величина δ, такая, что если $|x - x_0| < \delta$, то $f(x) \geqslant f(x_0)$, т. е. если существует окрестность точки x_0, такая, что для всех значений x в этой окрестности $f(x)$ больше $f(x_0)$. Функция $f(x)$ имеет глобальный минимум в точке x^*, если для всех x справедливо неравенство $f(x) \geqslant f(x^*)$.

На рис. 1.1 дано графическое представление функции $f(x)$, которая имеет локальный минимум в точке x_0 и глобальный минимум в точке x^*.

Классический подход к задаче нахождения значений x_0 и x^* состоит в поиске уравнений, которым они должны удовлетворять. Представленная на рис. 1.1 функция и ее производные непрерывны, и видно, что в точках x_0 и x^* производная $f'(x)$ (градиент функции) равна нулю. Следовательно, x_0 и x^* будут решениями уравнения

$$f'(x) = 0. \tag{1.1}$$

Точка x_m, в которой достигается локальный максимум, и точка x_c, в которой имеется точка горизонтального перегиба функции, также удовлетворяют этому уравнению. Следовательно, уравнение (1.1) является только *необ-*

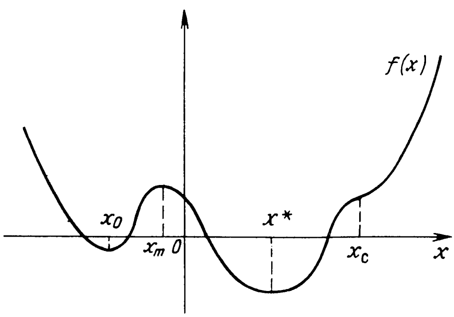

Рис. 1.1.

ходимым условием минимума, но не является *достаточным* условием минимума.

Заметим, однако, что в точках x_0 и x^* производная $f'(x)$ меняет знак с отрицательного на положительный. В точке x_m знак меняется с положительного на отрицательный, в то время как в точке x_c он не меняется. Следовательно, производная в минимуме является возрастающей функцией, а поскольку степень возрастания $f'(x)$ измеряется второй производной, можно ожидать, что $f''(x_0) > 0$, $f''(x^*) > 0$, тогда как $f''(x_m) < 0$.

Если, однако, вторая производная равна нулю, ситуация остается неопределенной.

Полученные выше результаты могут найти надежное обоснование, если рассмотреть разложение функции $f(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_0 (или x^*, или x_m), что, конечно, требует непрерывности функции $f(x)$ и ее производных:

$$f(x_0 + h) - f(x_0) = hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(x_0) + \ldots \tag{1.2}$$

Если в точке x_0 достигается минимум, то левая часть (1.2) будет неотрицательной для любого достаточно малого h ($|h| < \delta$). Следовательно, первая производная $f'(x_0)$ должна быть равна нулю, и это является достаточным условием (см. уравнение (1.1)). Если бы она была положительной, то достаточно малое отрицательное значение h делало бы правую часть (1.2) отрицательной, а если бы она была отрицательной, то достаточно малое положительное значение h делало бы правую часть отрицательной.

Так как в следующем члене (1.2) всегда $h^2 > 0$, то, если

$$f''(x_0) > 0, \tag{1.3}$$

в точке x_0 достигается минимум. Если $f'(x_m) = 0$ и $f''(x_m) < 0$, то из аналогичных соображений в точке x_m достигается максимум. Для определения различия между локальным и глобальным минимумами необходимо сравнить значения функций $f(x_0)$ и $f(x^*)$.

Пример 1

Исследовать характер точек перегиба функции $f(x) = x^3 - 2x^2 + x + 1$:

$f'(x) = 3x^2 - 4x + 1 = 0$,

тогда $(3x - 1)(x - 1) = 0$, т. е. $x = 1/3$ или $x = 1$.

При $x = 1/3$ производная $f'(x)$ меняет знак с положительного на отрицательный, а при $x = 1$ – с отрицательного на положительный. Следовательно, в точке $x = 1/3$ достигается максимум, а в точке $x = 1$ – минимум.

Этот пример может быть решен более простым способом, если вычислить вторую производную $f''(x) = 6x - 4$:

$f''(1/3) = -2$, т. е. отрицательна, и при $x = 1/3$ достигается максимум;

$f''(1) = 2$, т. е. положительна, и при $x = 1$ достигается минимум.

Неоднозначность, возникающую при $f''(x) = 0$, можно разрешить, увеличив количество членов в формуле разложения в ряд Тейлора:

$$f(x_0+h)-f(x)=hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\frac{h^3}{3!}f'''(x_0)+\frac{h^4}{4!}f''''(x_0)+\cdots$$

При этом можно сформулировать следующее правило:

Если функция $f(x)$ и ее производные непрерывны, то точка x_0 является точкой экстремума (максимума или минимума) тогда, и только тогда, когда n четное, где n – порядок первой необращающейся в нуль в точке x_0 производной. Если $f^n(x_0) < 0$, то в точке x_0 достигается максимум, если $f^n(x_0) > 0$, то в точке x_0 достигается минимум.

Пример 2

Найти точку перегиба функции $f(x) = (x-1)^6$:

$f'(x) = 6(x-1)^5 = 0$ при $x = 1$.

Первой необращающейся в нуль в точке $x = 1$ производной будет $f^6(1) = 6!$. Следовательно, функция $f(x)$ имеет минимум в точке $x = 1$.

1.2. ФУНКЦИИ n ПЕРЕМЕННЫХ

Рассмотрим функцию n действительных переменных

$f(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n) = f(\mathbf{x})$.

Точка в n-мерном евклидовом пространстве с координатами $x_1, x_2, x_3, \ldots$ $\ldots, x_n$ обозначается вектором-столбцом $\mathbf{x}$. Градиент функции, т. е. вектор с компонентами $\partial f/\partial x_1, \partial f/\partial x_2, \ldots, \partial f/\partial x_n$, обозначается $\nabla f(\mathbf{x})$ или, иногда, $\mathbf{g}(\mathbf{x})$. Матрица Гессе (гессиан) функции $f(\mathbf{x})$ обозначается как $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ и является симметрической матрицей $n \times n$ элементов вида

$$G_{ij}=\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}.$$

Функция $f(\mathbf{x})$ имеет локальный минимум в точке $\mathbf{x}_0$, если существует окрестность точки $\mathbf{x}_0$, такая, что $f(\mathbf{x})$ больше $f(\mathbf{x}_0)$ во всех точках этой окрестности, т. е. существует положительная величина δ, такая, что для $|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0| < \delta$ справедливо неравенство $f(\mathbf{x}) \geqslant f(\mathbf{x}_0)$.

В случае глобального минимума в точке $\mathbf{x}^*$ для всех $\mathbf{x}$ справедливо неравенство $f(\mathbf{x}) \geqslant f(\mathbf{x}^*)$.

При таких определениях и очевидных предположениях относительно дифференцируемости можно обобщить уравнение (1.2) и получить

$$f(\mathbf{x}_0+\mathbf{h})-f(\mathbf{x}_0)=\sum_{i=1}^{n} h_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1,\ldots,x_n)+\frac{1}{2!}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x_1,\ldots,x_n)+\cdots$$

$$=\mathbf{h}^{\mathrm{T}}\nabla f(\mathbf{x}_0)+\tfrac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}(\mathbf{x}_0)\mathbf{h}+\cdots \qquad (1.4)$$

Тогда, если $\mathbf{x}_0$ является точкой минимума функции $f(\mathbf{x})$, то каждая первая частная производная $\partial f/\partial x_i$ $(i = 1, \ldots, n)$ должна обращаться в нуль в точке $\mathbf{x}_0$. Если это не так, то соответствующим выбором h_i можно добиться того, что разность $f(\mathbf{x}_0+\mathbf{h}) - f(\mathbf{x}_0)$ будет отрицательна.

Следовательно, необходимым условием минимума в точке $\mathbf{x}_0$ является уравнение

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0, \tag{1.5}$$

т. е.

$$\frac{\partial f(x_0)}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 1, \ldots, n). \tag{1.6}$$

Тогда знак разности $f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) - f(\mathbf{x}_0)$ определяется членом

$$\tfrac{1}{2}\mathbf{h}^T \mathbf{G}(\mathbf{x}_0)\mathbf{h}. \tag{1.7}$$

Если матрица $\mathbf{G}(\mathbf{x}_0)$ положительно определена, то этот член положителен для всех $\mathbf{h}$. Следовательно, необходимыми и достаточными условиями минимума являются

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0, \; \mathbf{G}(\mathbf{x}_0) \text{ положительно определена.} \tag{1.8}$$

Необходимыми и достаточными условиями максимума являются

$$\nabla f(\mathbf{x}_m) = 0; \; \mathbf{G}(\mathbf{x}_m) \text{ отрицательно определена.} \tag{1.9}$$

Пример 1

Исследуйте экстремальную точку (точки) функции $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 4x_1 - 8x_2 - 12x_3 + 100$:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 4 \\ 2x_2 - 8 \\ 2x_3 - 12 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \text{при } x_1 = 2, x_2 = 4, x_3 = 6.$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$ положительно определена. Все собственные значения положительны и равны 2.

Следовательно, в точке (2; 4; 6) функция $f(\mathbf{x})$ достигает минимума.

1.3. МЕТОД НЬЮТОНА

Для функций одной переменной классический подход при поиске значений x в точках перегиба функции $f(x)$ состоит в решении уравнения

$$f'(x) = 0.$$

Решить такое уравнение не всегда просто. Поэтому кратко рассмотрим численный метод его решения. Приблизительный эскиз кривой $y = f'(x)$ позволит получить приближенное решение. Если можно найти два значения a и b, таких, что $f'(a)$ и $f'(b)$ имеют противоположные знаки, то тогда, в силу очевидных предположений о непрерывности, будет существовать корень η настоящего уравнения, причем $a < \eta < b$ (рис. 1.2).

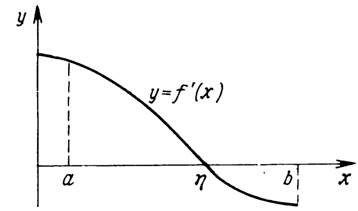

Рис. 1.2

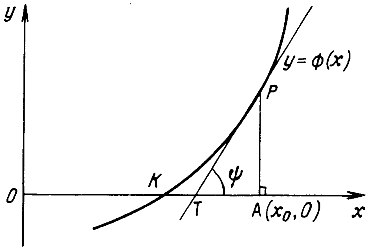

Рис. 1.3

Метод Ньютона позволяет улучшить относительно грубую аппроксимацию, чтобы получить корень уравнения $\varphi(x) \equiv 0$. [В данной задаче $\varphi(x) \equiv f'(x)$.] На рис. 1.3 точка x_0, являющаяся координатой x точки P, представляет собой аппроксимацию корня уравнения $\varphi(x) = 0$. Пусть PT – касательная к кривой в точке P, а T – точка, в которой касательная пересекает ось x. Тогда в общем случае $0T$ является лучшей аппроксимацией корня, лежащего в точке K.

Теперь $0T = 0A - TA = x_0 - TA$. Кроме того,

$$\frac{PA}{TA} = \operatorname{tg} \Psi = \varphi'(x_0),$$

следовательно,

$$TA = \frac{PA}{\varphi'(x_0)} = \frac{\varphi(x_0)}{\varphi'(x_0)}$$

и

$$x_1 = x_0 - \frac{\varphi(x_0)}{\varphi'(x_0)} .$$

Аналогично можно получить улучшенное значение для

$$x_2 = x_1 - \frac{\varphi(x_1)}{\varphi'(x_1)}$$

и в общем случае

$$x_{r+1} = x_r - \frac{\varphi(x_r)}{\varphi'(x_r)} . \tag{1.10}$$

Итерации могут быть продолжены до тех пор, пока для двух последующих аппроксимаций не будет достигнута требуемая точность. Приведенная ниже программа реализует этот алгоритм. Универсальность программы достигается за счет того, что функция $F = \varphi(x)$ вычисляется в подпрограмме, начиная со строки 1000, а функция $D = \varphi'(x)$ вычисляется в подпрограмме, начиная со строки 2000, для произвольного значения x. Точность решения может быть задана достаточно малой величиной E. Значение функции $FF = f(x)[f'(x) = \varphi(x)]$ вычисляется в подпрограмме, начиная со строки 3000.

```
10 PRINT "ПРОГРАММА ПОИСКА ТОЧЕК ПЕРЕГИБА ФУНКЦИИ F(x) "
20 REM ФУНКЦИЯ F(x) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 3000
30 REM ПЕРВАЯ ПРОИЗВОДНАЯ F'(x) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 1000
40 REM ВТОРАЯ ПРОИЗВОДНАЯ F''(x) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 2000
50 PRINT "ТРЕБУЕМАЯ ТОЧНОСТЬ ":INPUT E
60 PRINT "НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ":INPUT Z
70 PRINT "":PRINT "ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ "
80 X=Z
90 GOSUB 1000:GOSUB 2000
100 Z=X-F/D
110 PRINT X,Z
120 IF ABS(Z-X)>E THEN GOTO 80
130 PRINT " "
140 X=Z:GOSUB 1000:GOSUB 2000:GOSUB 3000
150 IF D>0 THEN PRINT "МИНИМУМ РАВЕН"FF"В ТОЧКЕ"X:GOTO 200
160 IF D<0 THEN PRINT "МАКСИМУМ РАВЕН"FF"В ТОЧКЕ"X:GOTO 200
200 END
1000 F=X-COS(X)
1010 RETURN
2000 D=1+SIN(X)
2010 RETURN
3000 FF=X*X/2-SIN(X)
3010 RETURN
```

Пример 1.

Найти минимум функции $y = \frac{1}{2}x^2 - \sin x$.

Приведенную выше программу можно использовать для решения этой задачи:

$f(x) = \frac{1}{2}x^2 - \sin x$.

Из приведенной ниже распечатки результата получим

$\varphi(x) = f'(x) = x - \cos x = 0$ при $x = 0{,}7391$.

Функция $\varphi'(x) = 1 + \sin x$ положительна при $x = 0{,}7391$.

Следовательно, минимум функции $y = -0{,}4005$ и достигается при $x = 0{,}7391$ с точностью до четырех десятичных знаков.

```
ПРОГРАММА ПОИСКА ТОЧЕК ПЕРЕГИБА ФУНКЦИИ F(x)
ТРЕБУЕМАЯ ТОЧНОСТЬ
 .00001
НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ
 .5

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ
 .5              .7552225
 .7552225        .7391416
 .7391416       .7390851
 .7390851        .7390851

МИНИМУМ РАВЕН -.4004886 В ТОЧКЕ  .7390851
```

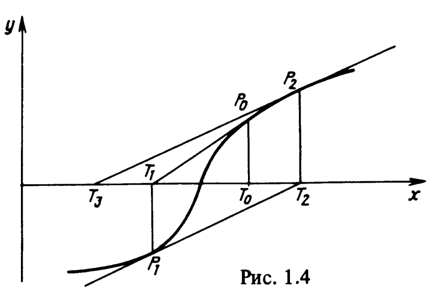

Рис. 1.4

Применение метода Ньютона будет неудачным, если первая аппроксимация корня такова, что отношение $\varphi(x_0)/\varphi'(x_0)$ недостаточно мало (рис. 1.4). Для того чтобы итерации сходились, в общем случае необходимо улучшить начальную аппроксимацию корня.

1.4. УПРАЖНЕНИЯ

1. Найдите значения максимума и минимума функции $f(x) = x(x-1)^2$.
2. Найдите значения максимума и минимума функции $f(x) = x/(x^2+1)$.
3. Покажите, что минимальным значением функции $a\cos\theta + b\sin\theta$ является $-\sqrt{a^2+b^2}$. Можете ли вы получить этот результат, не используя производных?
4. Равнобедренный треугольник с вертикальным углом 2θ вписан в окружность радиуса r. Найдите выражение для площади треугольника как функции от θ и покажите, что она максимальна, когда треугольник равносторонний.
5. Исследуйте функцию $f(x) = x^{2/3} - 1$. Нарисуйте ее график. Покажите, что $f(x)$ имеет минимум при $x = 0$. Чему равно значение $f'(x)$ при $x = 0$? Меняет ли знак $f'(x)$, если x возрастает при прохождении через 0?
6. Исследуйте функцию $f(x) = |x|$. Найдите ее минимум. Что можно сказать относительно поведения $f'(x)$ в точке минимума?
7. Найдите минимум функции $-e^{-x}\operatorname{sh}(x/2)$.
8. В процессе производства определенного количества некоторого товара его цена устанавливается равной £K. Товар хранится на складе до тех пор, пока не будет использован, и стоимость хранения одной единицы товара составляет £S в единицу времени. Норма потребления товара составляет R в единицу времени. Покажите, что если товар производится регулярно в количестве x в течение времени x/R, то стоимость функционирования такой системы в единицу времени

   $$C = \frac{KR}{x} + \frac{Sx}{2}.$$

   Покажите, что стоимость C достигает минимума при $x = \sqrt{2KR/S}$.
9. Исследуйте точки перегиба функции $f(x) = x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$. [Этот кажущийся простым пример иллюстрирует одну из классических задач. Требуется решить уравнение $f'(x) = 0$. В данном случае оно является кубическим уравнением, которое не так просто раскладывается на множители. Необычным является способ решения, при котором используется один из численных методов, описанных в следующей главе: он предназначается для минимизации функции $\varphi(x) = [f'(x)]^2$. Минимум функции $\varphi(x)$ равен нулю, а это означает, что получено решение уравнения $f'(x) = 0$.]
10. Исследуйте точки перегиба функции $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$.
11. Исследуйте точки перегиба функции $f(\mathbf{x}) = -x_1^2 - 6x_2^2 - 23x_3^2 - 4x_1x_2 + 6x_1x_3 + 20x_2x_3$.
12. Пусть $f(\mathbf{x})$ есть квадратичная функция вида

   $$f(\mathbf{x}) = a + \mathbf{b}^T\mathbf{x} + \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{G}\mathbf{x},$$

   где a – константа; $\mathbf{b}$ – вектор, не зависящий от $\mathbf{x}$, а $\mathbf{G}$ – положительно определенная симметрическая матрица, не зависящая от $\mathbf{x}$. Покажите, что $\mathbf{x}^* = -\mathbf{G}^{-1}\mathbf{b}$.
13. Покажите, что функция $f(\mathbf{x}) = (x_1 - a)^2 + (x_2 - b)^2 + (x_3 - c)^2$ имеет минимум в точке $(a; b; c)$.
14. Функция $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2)$ имеет минимум в точке $(x_1^*; x_2^*)$. Покажите, что условия (1.8) будут иметь следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1^*, x_2^*) = 0; \quad \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_1^*, x_2^*) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1^*, x_2^*) > 0,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1^*, x_2^*)\frac{\partial^2 f}{\partial x_2}(x_1^*, x_2^*) - \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1^*, x_2^*)\right]^2 > 0.$$

15. Фирма выпускает два аналогичных товара 1 и 2. Прибыль от реализации товара составляет $c_i q_i$ $(i = 1, 2)$, где c_i – константа, а q_i – объем реализации товара. Последний зависит от цен (p_1 и p_2) двух товаров. Анализ последних данных продажи дает следующие эмпирические зависимости:

$$\left.\begin{aligned} q_1 &= a_1 p_2 - b_1 p_1, \\ q_2 &= a_2 p_1 - b_2 p_2, \end{aligned}\right\}$$

где a_1, a_2, b_1, b_2 – положительные константы. Требуется определить цены p_1 и p_2, которые максимизируют общую прибыль.

Найдите уравнения для p_1 и p_2, которые максимизируют прибыль, и решите их. Покажите, что если решения этих уравнений положительны и $4b_1 b_2 > (a_1 + a_2)^2$, то эти уравнения дают оптимальные цены.

16. Найдите минимум функции $e^{-x} - \cos x$.

ГЛАВА 2. МЕТОДЫ ПОИСКА ДЛЯ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

2.1. ВВЕДЕНИЕ

Упражнение 9 разд. 1.4 иллюстрирует общую задачу, возникающую при классическом подходе. Уравнение $f'(x) = 0$ не решается простым способом, и поэтому мы вынуждены прибегать к численным методам. В этой главе будут рассмотрены несколько простых численных процедур, непосредственно локализирующих минимум функции $f(x)$.

С помощью численных методов мы непосредственно ищем минимум функции $f(x)$ в некотором интервале $a < x < b$, в котором, как предполагается, лежит минимум, вычисляя значения функции в выбранных точках данного интервала. Иногда это единственно возможная стратегия поиска. Например, стоимость проведения химического процесса может зависеть от температуры процесса. Инженер знает, что стоимость является функцией от T, хотя может и не знать явного вида функции. Однако он может поставить эксперимент и провести процесс при различных температурах и, следовательно, найти стоимости для этих температур и надеяться определить минимальную стоимость и температуру проведения процесса, при которой она достигается.

Можно попытаться найти положение минимума в точке, аппроксимирующей его с нужной точностью, или определить малый интервал, в котором находится минимум. Попытаемся достичь поставленной цели как можно более эффективным способом, т. е. осуществляя наименьшее количество вычислений функции. В приведенном выше примере, вероятно, невозможно точно ре-

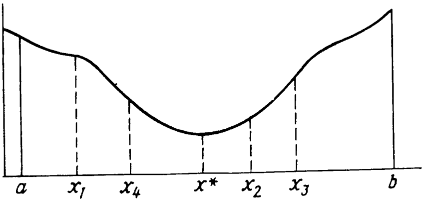

Рис. 2.1

гулировать температуру процесса, поэтому точность в 1°С или даже в 10°С может быть вполне приемлемой. Однако, поскольку проведение эксперимента требует определенных затрат, инженер захочет добиться этой точности, проведя как можно меньше экспериментов.

Предположим, что точки a и b определяют (возможно, очень грубо) интервал, который содержит истинную точку минимума, и внутри этого интервала функция унимодальна, т. е. имеет один минимум в точке x^*. Следовательно, данная функция имеет форму, близкую к той, что приведена на рис. 2.1. Если известны значения функции такого вида в трех точках x_1, x_2, x_3, таких, что $a < x_1 < x_2 < x_3 < b$, а $f(x_2) < f(x_1)$ и $f(x_2) < f(x_3)$, то $x_1 < x^* < x_3$.

Тогда точка x^* будет лежать внутри интервала $(x_1;\ x_3)$, меньшего по размеру, чем интервал $(a;\ b)$.

2.2. ПОИСК МЕТОДОМ ФИБОНАЧЧИ

Предположим, что нужно определить минимум как можно точнее, т. е. с наименьшим возможным интервалом неопределенности, но при этом можно выполнить только n вычислений функции. Как следует выбрать n точек, в которых вычисляется функция? С первого взгляда кажется ясным, что не следует искать решение для всех точек, получаемых в результате эксперимента. Напротив, надо попытаться сделать так, чтобы значения функции, полученные в предыдущих экспериментах, определяли положение последующих точек. Действительно, зная значения функции, мы тем самым имеем информацию о самой функции и положении ее минимума и используем эту информацию в дальнейшем поиске.

Предположим, что имеется интервал неопределенности (x_1, x_3) и известно значение функции $f(x_2)$ внутри этого интервала (см. рис. 2.1). Если можно вычислить функцию всего один раз в точке x_4, то где следует поместить точку x_4, для того чтобы получить наименьший возможный интервал неопределенности?

Положим $x_2 - x_1 = L$ и $x_3 - x_2 = R$, причем $L > R$, как показано на рис. 2.1, и эти значения будут фиксированы, если известны x_1, x_2 и x_3. Если x_4 находится в интервале $(x_1;\ x_2)$, то:

1) если $f(x_4) < f(x_2)$, то новым интервалом неопределенности будет (x_1, x_2) длиной $x_2 - x_1 = L$;
2) если $f(x_4) > f(x_2)$, то новым интервалом неопределенности будет (x_4, x_3) длиной $x_3 - x_4$.

Поскольку не известно, какая из этих ситуаций будет иметь место, выберем x_4 таким образом, чтобы минимизировать наибольшую из длин $x_3 - x_4$

и $x_2 - x_1$. Достигнуть этого можно, сделав длины $x_3 - x_4$ и $x_2 - x_1$ равными, т. е. поместив x_4 внутри интервала симметрично относительно точки x_2, уже лежащей внутри интервала. Любое другое положение точки x_4 *может* привести к тому, что полученный интервал будет больше L. Помещая x_4 симметрично относительно x_2, мы ничем не рискуем в любом случае.

Если окажется, что можно выполнить еще одно вычисление функции, то следует применить описанную процедуру к интервалу (x_1, x_2), в котором уже есть значение функции, вычисленное в точке x_4, или к интервалу (x_4, x_3), в котором уже есть значение функции, вычисленное в точке x_2. Следовательно, стратегия ясна с самого начала. Нужно поместить следующую точку внутри интервала неопределенности симметрично относительно уже находящейся там точке. Парадоксально, но, чтобы понять, как следует начинать вычисления, необходимо разобраться в том, как его следует кончать.

На n-м вычислении n-ю точку следует поместить симметрично по отношению к $(n-1)$-й точке. Положение этой последней точки в принципе зависит от нас. Для того чтобы получить наибольшее уменьшение интервала на данном этапе, следует разделить пополам предыдущий интервал. Тогда точка x_n будет совпадать с точкой x_{n-1}. Однако при этом мы не получаем никакой новой информации. Обычно точки x_{n-1} и x_n отстоят друг от друга на достаточном расстоянии, чтобы определить, в какой половине, левой или правой, находится интервал неопределенности. Они помещаются на расстоянии $\epsilon/2$ по обе стороны от середины отрезка L_{n-1}; можно самим задать величину ϵ или выбрать эту величину равной минимально возможному расстоянию между двумя точками. (Предположим, что в нашем примере инженер может регулировать температуру с интервалом в 1°С, поэтому $\varepsilon = 1$.)

Интервал неопределенности будет иметь длину L_n, следовательно,

$L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon$ (рис. 2.2, нижняя часть).

На предыдущем этапе точки x_{n-1} и x_{n-2} должны быть помещены симметрично внутри интервала L_{n-2} на расстоянии L_{n-1} от концов этого интервала. Следовательно,

$L_{n-2} = L_{n-1} + L_n$ (рис. 2.2, средняя часть).

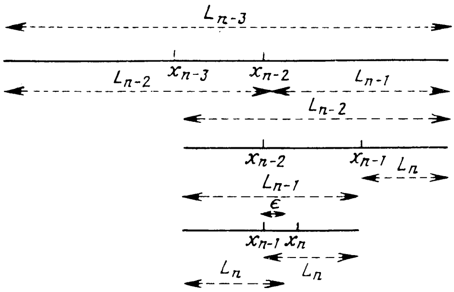

Рис. 2.2

Замечание. Из рисунка ясно, что на предпоследнем этапе x_{n-2} остается в качестве внутренней точки.

Аналогично

$L_{n-3} = L_{n-2} + L_{n-1}$ (рис. 2.2, верхняя часть)

В общем случае

$$L_{j-1} = L_j + L_{j+1} \quad \text{при } 1 < j < n. \qquad (2.1)$$

Таким образом,

$$L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon,$$

$$L_{n-2} = L_{n-1} + L_n = 3L_n - \varepsilon,$$

$$L_{n-3} = L_{n-2} + L_{n-1} = 5L_n - 2\varepsilon,$$

$$L_{n-4} = L_{n-3} + L_{n-2} = 8L_n - 3\varepsilon \quad \text{и т. д.}$$

Если определить последовательность чисел Фибоначчи следующим образом: $F_0 = 1, F_1 = 1$ и $F_k = F_{k-1} + F_{k-2}$ для $k = 2, 3, \ldots$, то

$$L_{n-j} = F_{j+1} L_n - F_{j-1}\varepsilon, \quad j = 1, 2, \ldots, n-1. \qquad (2.2)$$

Если начальный интервал (a, b) имеет длину L_1 $(= b - a)$, то

$L_1 = F_n L_n - \varepsilon F_{n-2}$,

т. е.

$$L_n = \frac{L_1}{F_n} + \varepsilon \frac{F_{n-2}}{F_n}. \qquad (2.3)$$

Следовательно, произведя n вычислений функции, мы уменьшим начальный интервал неопределенности в $1/F_n$ раз по сравнению с его начальной длиной (пренебрегая ε), и это – наилучший результат.

Если поиск начат, то его несложно продолжить, используя описанное выше правило симметрии. Следовательно, необходимо найти положение первой точки, которая помещается на расстоянии L_2 от одного из концов начального интервала, причем не важно, от какого конца, поскольку вторая точка помещается согласно правилу симметрии на расстоянии L_2 от второго конца интервала:

$$L_2 = F_{n-1} L_n - \varepsilon F_{n-3} =$$

$$= F_{n-1} \frac{L_1}{F_n} + \varepsilon \frac{(F_{n-1}F_{n-2} - F_n F_{n-3})}{F_n} =$$

$$= \frac{F_{n-1}}{F_n} L_1 + \frac{(-1)^n \varepsilon}{F_n}. \qquad (2.4)$$

После того как найдено положение первой точки, числа Фибоначчи больше не нужны. Используемое значение ϵ может определяться из практических со-

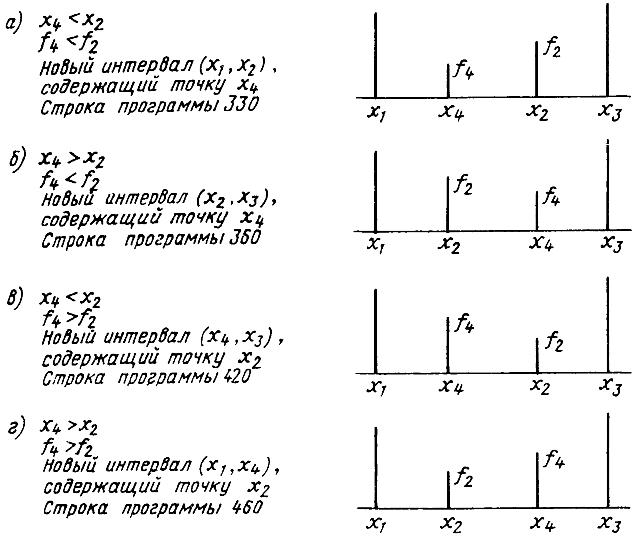

Рис. 2.3

ображений. Оно должно быть меньше L_1/F_{n+1}, в противном случае мы будем напрасно тратить время на вычисление функции (см. упр. 3 разд. 2.8).

Таким образом, поиск методом Фибоначчи, названный так ввиду появления при поиске чисел Фибоначчи, является итерационной процедурой. В процессе поиска интервала (x_1, x_2) с точкой x_2, уже лежащей в этом интервале, следующая точка x_4 всегда выбирается такой, что $x_3 - x_4 = x_2 - x_1$ или $x_4 - x_1 = x_3 - x_2$, т. е.

$$x_4 = x_1 - x_2 + x_3. \tag{2.5}$$

Если $f(x_2) = f_2$ и $f(x_4) = f_4$, то можно рассмотреть четыре случая (рис. 2.3).

В приведенной ниже программе реализованы указанные выше случаи. В том виде, как она приведена здесь, эта программа позволяет производить до 40 вычислений функции. В программе исследуется функция $f(x) = x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$ (см. строку 1000).

```
20 PRINT "ПОИСК МЕТОДОМ ФИБОНАЧЧИ":PRINT "":PRINT ""
30 REM В ПРОГРАММЕ ПРОИЗВОДИТСЯ ПОИСК ОТРЕЗКА (A,B),
40 REM СОДЕРЖАЩЕГО ТОЧКУ МИНИМУМА УНИМОДАЛЬНОЙ
50 REM ФУНКЦИИ F(X), ЗА N ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ. ФУНКЦИЯ F(X)
60 REM ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 1000 В ВИДЕ Z=F(X).
70 REM НЕОБХОДИМЫЕ ЧИСЛА ФИБОНАЧЧИ
80 REM ВЫЧИСЛЯЮТСЯ ЗДЕСЬ ЖЕ.
90 REM
100 DIM F(40)
110 PRINT "ЗАДАЙТЕ N":INPUT N
120 F(0)=1:F(1)=1
130 FOR I=2 TO N
140 F(I)=F(I-1)+F(I-2)
```

```
150 NEXT I
160 PRINT "ЗАДАЙТЕ EPSILON":INPUT E
200 PRINT "ЗАДАЙТЕ ИНТЕРВАЛ (A,B)"
210 INPUT A,B
250 X1=A:X2=A+((B-A)*F(N-1)+E*(-1)^N)/F(N):X3=B
260 X=X2:GOSUB 1000:F2=Z
270 PRINT "          ТЕКУЩИЙ ИНТЕРВАЛ"
280 K=1:PRINT X1,X3
290 X4=X1-X2+X3
300 X=X4:GOSUB 1000:F4=Z
310 IF F4>F2 THEN GOTO 400
320 IF X2<X4 THEN GOTO 360
330 X3=X2:X2=X4:F2=F4:PRINT X1,X3
340 GOTO 500
360 X1=X2:X2=X4:F2=F4:PRINT X1,X3
370 GOTO 500
400 IF X2<X4 THEN GOTO 460
420 X1=X4:PRINT X1,X3
430 GOTO 500
460 X3=X4:PRINT X1,X3
500 K=K+1
510 IF K<=N THEN GOTO 290
600 PRINT "КОНЕЧНЫЙ ИНТЕРВАЛ":PRINT X1,X3
610 PRINT "ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ РАВНО",F2
650 END
1000 Z=X*X*X*X-14*X*X*X+60*X*X-70*X
1010 RETURN
```

Пример 1

Использовать метод Фибоначчи для поиска минимума функции $f(x) = 2x^2 - e^x$ в интервале $(0, 1)$ при 10-кратном вычислении функции.

Как видно из приведенной ниже распечатки, значение ϵ выбрано равным нулю.

Окончательный интервал неопределенности имеет длину

$$0{,}359550563 - 0{,}348314606 = 0{,}01123957 \approx \frac{1}{89} = \frac{1}{F_{10}}.$$

С точностью до шестого знака после запятой минимум достигается в точке $x^* = 0{,}357403$, и в этой точке $f(x^*) = -1{,}174138$.

```
ПОИСК МЕТОДОМ ФИБОНАЧЧИ


ЗАДАЙТЕ N
 10
ЗАДАЙТЕ EPSILON
 0
ЗАДАЙТЕ ИНТЕРВАЛ (A,B)
 0               1
        ТЕКУЩИЙ ИНТЕРВАЛ
 0               1
 0               .6179775
 .235955        .6179775
 .235955        .47191
 .3258425       .47191
 .3258425       .41573
 .3258425       .3820225
 .348315       .3820225
 .348315       .3707875
 .35955         .3707875
 .35955         .370785
КОНЕЧНЫЙ ИНТЕРВАЛ
 .35955         .370785
ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ РАВНО       -1.174132
```

Пример 2

Найти минимум функции $f(x) = x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$ в интервале $(0, 2)$. Использовать 20 вычислений функции (см. упр. 9 разд. 1.4).

Функция $z = f(x)$ вычисляется в строке 1000 при $N = 20$ и $\varepsilon = 0$. Распечатка результата приведена ниже:

```
ПОИСК МЕТОДОМ ФИБОНАЧЧИ


ЗАДАЙТЕ N
 20
ЗАДАЙТЕ EPSILON
 0
ЗАДАЙТЕ ИНТЕРВАЛ (A,B)
 0               2
        ТЕКУЩИЙ ИНТЕРВАЛ
 0               2
 0               1.236068
 .472136        1.236068
 .472136        .9442721
 .6524761       .9442721
 .6524761       .8328161
 .7213602       .8328161
 .763932         .8328161
 .763932         .8065038
 .763932         .7902443
 .773985         .7902443
 .773985         .7840378
 .7778313        .7840378
 .7778313        .7816778
 .7793176        .7816778
 .7801915       .7816778
 .7801915       .7810653
 .7804528        .7810653
 .7807141       .7810653
 .780804         .7810653
 .780804         .7809753
КОНЕЧНЫЙ ИНТЕРВАЛ
 .780804         .7809753
ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ РАВНО          -24.3696
```

2.3. ПОИСК МЕТОДОМ "ЗОЛОТОГО СЕЧЕНИЯ"

Не всегда можно заранее определить, сколько раз придется вычислять функцию. В методе Фибоначчи это нужно знать для определения L_2, т. е. положения начальной точки (см. уравнение (2.4)).

Метод "золотого сечения" почти столь же эффективен, как и метод Фибоначчи, однако при этом не требуется знать n – количество вычислений функции, определяемое вначале. После того как выполнено j вычислений, исходя из тех же соображений, что и ранее (см. уравнение (2.1)), записываем

$$L_{j-1} = L_j + L_{j+1}. \tag{2.6}$$

Однако если n не известно, то мы не можем использовать условие $L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon$. Если отношение последующих интервалов будет постоянным, т. е.

$$\frac{L_{j-1}}{L_j} = \frac{L_j}{L_{j+1}} = \frac{L_{j+1}}{L_{j+2}} = \ldots = \tau, \tag{2.7}$$

то

$$\frac{L_{j-1}}{L_j} = 1 + \frac{L_{j+1}}{L_j},$$

т. е. $\tau = 1 + 1/\tau$.

Таким образом, $\tau^2 - \tau - 1 = 0$, откуда $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 \approx 1{,}618033989$. Тогда

$$\frac{L_{j-1}}{L_{j+1}} = \tau^2, \quad \frac{L_{j-2}}{L_{j+1}} = \tau^3 \quad \text{и т. д.}$$

Следовательно, $\dfrac{L_1}{L_n} = \tau^{n-1}$,

т.е.

$$L_n = \frac{L_1}{\tau^{n-1}} \quad . \tag{2.8}$$

В результате анализа двух рассмотренных значений функции будет определен тот интервал, который должен исследоваться в дальнейшем. Этот интервал будет содержать одну из предыдущих точек и следующую точку, помещаемую симметрично ей. Первая точка находится на расстоянии L_1/τ от одного конца интервала, вторая – на таком же расстоянии от другого. Поскольку $\lim\limits_{n\to\infty} F_{n-1}/F_n = 1/n$ (см. упр. 2 разд. 2.8), то из уравнения (2.4) видно, что поиск методом "золотого сечения" является предельной формой поиска методом Фибоначчи. Название "золотое сечение" произошло от названия отношения в уравнении (2.7). Видно, что L_{j-1} делится на две части так, что отношение целого к большей части равно отношению большей части к меньшей, т. е. равно так называемому "золотому отношению".

Таким образом, если ищется интервал (x_0, x_3) и имеются два значения функции f_1 и f_2 в точках x_1 и x_2, то следует рассмотреть два случая (рис. 2.4).

Следующая программа реализует поиск методом "золотого сечения". Заданная точность может, конечно, меняться выбором значения в строке 300. Ниже приведена распечатка результата использования метода "золотого се-

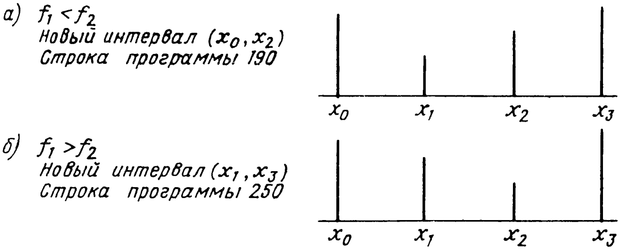

Рис. 2.4

чения" для функции $f(x) = -e^{-x}\ln(x)$. Поиск производится в интервале $(0, 2)$.

Истинный минимум находится в точке 1,76322211, где значение функции равно −0,0972601313.

```
5 DEFDBL A-Z
10 PRINT "        МЕТОД ЗОЛОТОГО СЕЧЕНИЯ":PRINT "":PRINT ""
20 REM ПРОГРАММА ПРОИЗВОДИТ ПОИСК ИНТЕРВАЛА
30 REM (A,B), В КОТОРОМ ЛЕЖИТ ТОЧКА МИНИМУМА
40 REM УНИМОДАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ F(X).
50 REM ОКОНЧАТЕЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ X ПОЛУЧЕНО С ТОЧНОСТЬЮ 4D
60 REM F(X) ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 1000 В ВИДЕ Z=..
90 PRINT "ЗАДАЙТЕ ИНТЕРВАЛ (A,B)":INPUT A,B
100 T1=.3819660113#:T2=1-T1
110 X0=A:X1=A+T1*(B-A):X2=A+T2*(B-A):X3=B
120 X=X1:GOSUB 1000:F1=Z
140 X=X2:GOSUB 1000:F2=Z
150 PRINT "ТЕКУЩИЙ ИНТЕРВАЛ"
170 PRINT X0,X3
180 IF F2<F1 THEN GOTO 250
190 I=X2-X0:X3=X2:X2=X1:X1=X0+T1*I
200 F2=F1:X=X1:GOSUB 1000
210 F1=Z:GOTO 300
250 I=X3-X1:X0=X1:X1=X2:X2=X0+T2*I
260 F1=F2:X=X2:GOSUB 1000:F2=Z
300 IF I>.00005 THEN GOTO 170
450 PRINT
470 PRINT "X="X1,"F(X)="F1
500 END
1000 Z=-EXP(-X)*LOG(X)
1010 RETURN
```

```
        МЕТОД ЗОЛОТОГО СЕЧЕНИЯ


ЗАДАЙТЕ ИНТЕРВАЛ (A,B)
 0              2
ТЕКУЩИЙ ИНТЕРВАЛ
 0              2
 .7639320226    2
 1.2360679774                  2
 1.527864044976863             2
 1.708203932423137             2
 1.708203932423137             1.888543819995464
 1.708203932423137             1.819660112468496
 1.708203932423137             1.777087639941836
 1.73451516742761              1.777087639941836
 1.750776404949797             1.777087639941836
 1.750776404949797             1.76703764245955
 1.756987644980199             1.76703764245955
 1.760826402424398             1.76703764245955
 1.760826402424398             1.764665159878096
 1.762292677297335             1.764665159878096
 1.762292677297335             1.763758952169844
 1.762292677297335             1.763198885008787
 1.762638817842288             1.763198885008787
 1.762638817842288             1.762984958387139
 1.762771031765554             1.762984958387139
 1.762771031765554             1.762903245688782
 1.762821532990448             1.762903245688782
 1.762821532990448             1.762872034215326

X= 1.762852744461857          F(X)=-9.726013243198395D-02
```

2.4. АППРОКСИМАЦИЯ КРИВЫМИ

В двух предыдущих разделах была сделана попытка найти *малый* интервал, в котором находится минимум функции. В следующих двух разделах применяется иной подход. Используется несколько значений функции в определенных точках для аппроксимации функции обычным полиномом по крайней мере в небольшой области значений. Затем положение минимума функции аппроксимируется положением минимума полинома, поскольку последний вычислить проще.

2.5. КВАДРАТИЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Если известны значения функции $f(x)$ в трех различных точках α, β, γ, равные соответственно f_α, f_β, f_γ, то функция $f(x)$ может быть аппроксимирована квадратичной функцией

$$\varphi(x) = Ax^2 + Bx + C, \tag{2.9}$$

где A, B и C определяются из уравнений

$$\begin{aligned} &A\alpha^2 + B\alpha + C = f_\alpha, \\ &A\beta^2 + B\beta + C = f_\beta, \\ &A\gamma^2 + B\gamma + C = f_\gamma. \end{aligned} \tag{2.10}$$

После преобразований этих уравнений получаем

$$\begin{aligned} A &= [(\gamma - \beta) f_\alpha + (\alpha - \gamma) f_\beta + (\beta - \alpha) f_\gamma]/\Delta, \\ B &= [(\beta^2 - \gamma^2) f_\alpha + (\gamma^2 - \alpha^2) f_\beta + (\alpha^2 - \beta^2) f_\gamma]/\Delta, \\ C &= [\beta\gamma(\gamma - \beta) f_\alpha + \gamma\alpha(\alpha - \gamma) f_\beta + \alpha\beta(\beta - \alpha) f_\gamma]/\Delta, \end{aligned} \tag{2.11}$$

где $\Delta = (\alpha - \beta)(\beta - \gamma)(\gamma - \alpha)$. Ясно, что $\varphi(x)$ будет иметь минимум в точке $x = -B/2A$, если $A > 0$. Следовательно, можно аппроксимировать точку минимума функции $f(x)$ значением

$$\delta = \frac{1}{2}\left[\frac{(\beta^2 - \gamma^2) f_\alpha + (\gamma^2 - \alpha^2) f_\beta + (\alpha^2 - \beta^2) f_\gamma}{(\beta - \gamma) f_\alpha + (\gamma - \alpha) f_\beta + (\alpha - \beta) f_\gamma}\right]. \tag{2.12}$$

Этот метод может непосредственно применяться к функциям одной переменной. Он может быть очень полезен для выполнения линейного поиска в процедурах, описанных в гл. 4. В этих процедурах требуется найти минимум функции $f(\mathbf{x})$ в точках прямой $\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}$, где $\mathbf{x}_0$ – заданная точка, а $\mathbf{d}$ определяет заданное направление. Значения функции $f(\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d})$ на этой прямой являются значениями функции одной переменной λ:

$$\varphi(\lambda) = f(\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}). \tag{2.13}$$

Идеи и результаты, изложенные выше, преобразуются в вычислительные процедуры, описанные далее. Предположим, что заданы унимодальная функ

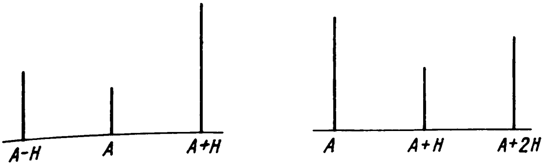

Рис. 2.5

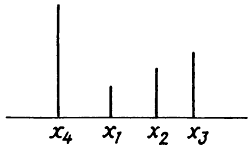

Рис. 2.6

ция одной переменной $f(x)$, начальная аппроксимация положения минимума и длина шага H, являющаяся величиной того же порядка, что и расстояние от точки A до точки истинного минимума x^* (условие, которое не всегда просто удовлетворить). Вычислительная процедура имеет следующие шаги:

1. Вычислить $f(A)$ и $f(A+H)$.
2. Если $f(A) < f(A+H)$, то взять в качестве третьей точки $A - H$ и вычислить $f(A - H)$. В противном случае в качестве третьей точки взять $A + 2H$ и найти $f(A + 2H)$ (рис. 2.5).
3. Используя эти три точки, найти δ из уравнения (2.12) и вычислить $f(\delta)$.
4. Если разница между наименьшим значением функции и следующим наименьшим значением функции меньше заданной точности, то процедура заканчивается.
5. Если процедура не завершалась на шаге 4, то точка с наибольшим значением обычно отбрасывается, и мы возвращаемся на шаг 3. Но если, оставив точку с наибольшим значением функции, мы определим конечные границы интервала, в котором лежит минимум, то следует действительно оставить это значение и затем вернуться на шаг 3. Например, на рис. 2.6 оставлены точки x_1, x_2 и x_4, а не точки x_1, x_2 и x_3.

В программе, распечатка которой приведена ниже, реализована эта процедура.

Заметим, что если точность E задана слишком малой, то α, β, γ, а также f_α, f_β, f_γ будут очень близки друг к другу и значение δ (см. уравнение (2.12)) может стать вообще недостижимыми. Чтобы преодолеть эту трудность, перепишем уравнение (2.12) для второй и последующих интерполяций:

$$\delta = \tfrac{1}{2}(\alpha+\beta) + \frac{\tfrac{1}{2}(f_\alpha - f_\beta)(\beta-\gamma)(\gamma-\alpha)}{(\beta-\gamma)\,f_\alpha + (\gamma-\alpha)\,f_\beta + (\alpha-\beta)\,f_\gamma}. \tag{2.14}$$

```
10 PRINT "КВАДРАТИЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ"
20 REM ПРОГРАММА РЕАЛИЗУЕТ ПРОЦЕДУРУ
25 REM КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПАУЭЛЛА ДЛЯ
30 REM ПОИСКА МИНИМУМА ФУНКЦИИ F(X),
40 REM ВЫЧИСЛЯЕМОЙ В ВИДЕ Z=F(X) В СТРОКЕ 1000
100 PRINT"ЗАДАЙТЕ НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ":INPUT A
110 PRINT"ЗАДАЙТЕ ШАГ H":INPUT H
150 PRINT"ЗАДАЙТЕ ТОЧНОСТЬ E":INPUT E
190 REM НАЧАТЬ ПРОЦЕСС С ПЕРВЫХ ТРЕХ ТОЧЕК
200 DIM X(4),F(4)
210 X(1)=A:X=X(1):GOSUB 1000:F(1)=Z
220 X(2)=A+H:X=X(2):GOSUB 1000:F(2)=Z
230 IF F(1)<F(2) THEN X(3)=A-H:X=X(3):GOSUB 1000:F(3)=Z:GOTO 250
```

```
240 X(3)=A+2*H:X=X(3):GOSUB 1000:F(3)=Z
250 PRINT"          ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
260 PRINT"      X(I)            F(I)"
270 REM ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЕРВОГО АППРОКСИМИРУЮЩЕГО МИНИМУМА
275 REM В СТРОКАХ 300-350
300 DN=(X(2)-X(3))*F(1)
310 DN=DN+(X(3)-X(1))*F(2)+(X(1)-X(2))*F(3)
320 NM=(X(2)*X(2)-X(3)*X(3))*F(1)
330 NM=NM+(X(3)*X(3)-X(1)*X(1))*F(2)
340 NM=NM+(X(1)*X(1)-X(2)*X(2))*F(3)
350 X(4)=NM/(2*DN):X=X(4):GOSUB 1000:F(4)=Z
380 REM УПОРЯДОЧИТЬ ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ В СТРОКАХ 400-460
400 FOR J=1 TO 3
410 FOR K=J+1 TO 4
420 IF F(J)<=F(K) THEN GOTO 460
430 X=X(J):X(J)=X(K):X(K)=X
440 F=F(J):F(J)=F(K):F(K)=F
450 REM ПОМЕНЯТЬ МЕСТАМИ F(J) И F(K), А ТАКЖЕ X(J) И X(K),
455 REM ЕСЛИ ОНИ НЕ УПОРЯДОЧЕНЫ
460 NEXT K:NEXT J
470 FOR I=1 TO 4:PRINT X(I),F(I):NEXT I
480 PRINT "":PRINT ""
490 REM ЗАКОНЧИТЬ, ЕСЛИ ПОЛУЧЕНА ЗАДАННАЯ ТОЧНОСТЬ
500 IF ABS(X(1)-X(2))<E THEN GOTO 800
510 REM ЗАПОМНИТЬ ТРИ ЛУЧШИХ ТОЧКИ
520 S1=SGN(X(2)-X(1)):S2=SGN(X(3)-X(1))
530 S3=SGN(X(4)-X(1))
540 IF S1=S2 AND S1=-S3 THEN X(3)=X(4):F(3)=F(4)
550 REM ВТОРАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
560 DN=(X(2)-X(3))*F(1)+(X(3)-X(1))*F(2)+(X(1)-X(2))*F(3)
570 F=(F(1)-F(2))/(2*DN)
580 F=F*(X(2)-X(3))*(X(3)-X(1))
590 X(4)=(X(1)+X(2))/2+F
600 X=X(4):GOSUB 1000:F(4)=Z
610 REM ПОВТОРИТЬ ВТОРУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ
620 GOTO 400
800 PRINT" "
810 PRINT"X="X(1),"F="F(1)
850 END
1000 Z=2*X*X-EXP(X)
1010 RETURN
```

Пример 1

Используя квадратичную интерполяцию, найти минимум функции точностью 0,001. В качестве начальных значений положить $A = 1$ и $H =$

Ниже представлена распечатка результатов.

```
КВАДРАТИЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
ЗАДАЙТЕ НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ 1
ЗАДАЙТЕ ШАГ H .5
ЗАДАЙТЕ ТОЧНОСТЬ E .0005
        ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
     X(I)            F(I)
 .5              -1.148721
 .0470197        -1.043721
 1                -.7182818
 1.5               1.831102E-02


 .3745917        -1.17376
 .5               -1.148721
 .0470197        -1.043721
 1                -.7182818
```

```
.3615043        -1.174117
.3745917        -1.17376
.5              -1.148721
.0470197        -1.043721


.357937         -1.174138
.3615043        -1.174117
.3745917        -1.17376
.0470197        -1.043721


.3575219        -1.174138
.357937         -1.174138
.3615043        -1.174117
.0470197        -1.043721


X= .3575219     F=-1.174138
```

2.6. КУБИЧЕСКАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Квадратичная интерполяция, рассмотренная в предыдущем разделе, часто называется методом Пауэлла и аппроксимирует функцию квадратичным трехчленом. Излагаемый в настоящем разделе метод Давидона обеспечивает бо́льшую точность и аппроксимирует функцию кубическим полиномом. Для кубической интерполяции в этом методе используются значения функции и ее производной, вычисленные в двух точках. Этот метод широко используется в процедурах линейного поиска в гл. 4, и именно с этой точки зрения мы и будем его изучать.

Рассмотрим задачу минимизации функции $f(\mathbf{x})$ на прямой $\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d}$, т. е. минимизацию функции

$$\varphi(h) = f(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d}) = \\ = f(x_{01} + hd_1, x_{02} + hd_2, \ldots, x_{0n} + hd_n);$$

$$\frac{d\varphi}{dh} = \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d})\, d_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d})\, d_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d})\, d_n. \tag{2.15}$$

Следовательно,

$$\frac{d\varphi}{dh} = \nabla f(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d})^{\mathrm{T}}\, \mathbf{d} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_0 + h\mathbf{d})^{\mathrm{T}}\, \mathbf{d}. \tag{2.16}$$

Предполагаем, что известны следующие значения:

$$\varphi(p) = \varphi_p, \quad \varphi(q) = \varphi_q,$$

$$\frac{d\varphi}{dh}(p) = G_p, \quad \frac{d\varphi}{dh}(q) = G_q. \tag{2.17}$$

Эту информацию можно использовать для построения кубического полинома

$$a + bh + ch^2 + dh^3, \tag{2.18}$$

который будет аппроксимировать функцию $\varphi(h)$. Если $p = 0$, то уравнения, определяющие a, b, c, d выглядят так:

$$\begin{aligned} a &= \varphi_p, \\ a + bq + cq^2 + dq^3 &= \varphi_q, \\ b &= G_p, \\ b + 2cq + 3dq^2 &= G_q. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Эти уравнения имеют следующее решение:

$$a = \varphi_p, \quad b = G_p, \quad c = -\frac{(G_p + z)}{q}, \quad d = \frac{G_p + G_q + 2z}{3q^2}, \tag{2.20}$$

где

$$z = \frac{3(\varphi_p - \varphi_q)}{q} + G_p + G_q.$$

Точки перегиба кубического полинома являются решением уравнения

$$G_p - 2(G_p + z)\frac{h}{q} + (G_p + G_q + 2z)\left(\frac{h}{q}\right)^2 = 0.$$

Следовательно, если r является точкой минимума кубического полинома, то

$$\frac{r}{q} = \frac{(G_p + z) \pm [(G_p + z)^2 - G_p(G_p + G_q + 2z)]^{1/2}}{G_p + G_q + 2z} = \frac{G_p + z \pm w}{G_p + G_q + 2z}, \tag{2.21}$$

где

$$w = (z^2 - G_pG_q)^{1/2}. \tag{2.22}$$

Одно из значений (2.21) соответствует минимуму. Вторая производная равна

$$2c + 6dh. \tag{2.23}$$

Если мы выбираем положительный знак, то при

$$\frac{h}{q} = \frac{G_p + z + w}{G_p + G_q + 2z}$$

вторая производная будет

$$-\frac{2(G_p + z)}{q} + \frac{2(G_p + G_q + 2z)}{q^2} \cdot \frac{q(G_p + z + w)}{(G_p + G_q + 2z)} =$$

$$= \frac{1}{q}(-2G_p - 2z + 2G_p + 2z + 2w) = \frac{2w}{q} > 0.$$

$$\frac{r}{q} = \frac{G_p + z + w}{G_p + G_q + 2z}. \tag{2.24}$$

Лучшие численные результаты получаются при использовании следующей эквивалентной формулы:

$$\frac{r}{q} = 1 - \frac{G_q + w - z}{G_q - G_p + 2w} = \frac{z + w - G_p}{G_q - G_p + 2w}. \tag{2.25}$$

Доказательство эквивалентности уравнений (2.24) и (2.25) оставлено в качестве упражнения.

Выбор точки q оставлен на наше усмотрение. Если $G_p < 0$, то следует выбрать значение q положительным, т. е. сделать шаг в направлении убывания функции $\varphi(h)$, в противном случае значение q следует выбрать отрицательным. Значение q должно быть таким, чтобы интервал $(0, q)$ содержал минимум. Это будет справедливо, если $\varphi_q > \varphi_p$ (рис. 2.7, *а*) или если $G_q > 0$ (рис. 2.7, *б*).

Если ни одно из этих условий не выполнено, то мы удваиваем значение q, повторяя это в случае необходимости до тех пор, пока указанный интервал не будет содержать минимум.

Остается задача определения начального значения q. Имеются реальные трудности в определении такого значения, которое было бы приемлемо для всех задач. Давидон, Флетчер и Пауэлл предложили выбирать q следующим образом:

$$q = \min\{\eta, -2(\varphi_p - \varphi_m)/G_p\}, \tag{2.26}$$

где φ_m – оценка наименьшего значения истинного минимума $\varphi(h)$, а η – константа, значение которой обычно выбирается равным 2 или 1.

Эта итерационная процедура имеет следующие шаги:

1. Найти $\varphi_p = f(\mathbf{x}_0)$ и $G_p = [\mathbf{g}(\mathbf{x}_0)]^T\mathbf{d}$.
2. Проверить, выполняется ли условие $G_p < 0$, и если оно не выполняется, производить поиск вдоль направления $-\mathbf{d}$. Выбрать q из выражения (2.26). При этом необходимо "угадать" φ_m.
3. Вычислить $\varphi_q = f(\mathbf{x}_0 + q\mathbf{d})$ и $G_q = [\mathbf{g}(\mathbf{x}_0 + q\mathbf{d})]^T\mathbf{d}$.

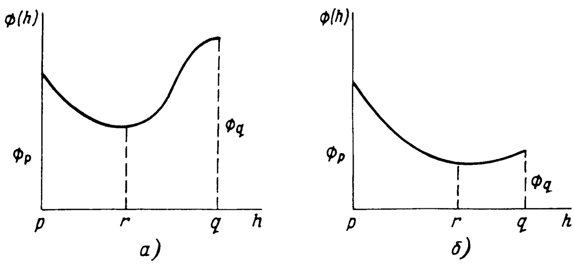

Рис. 2.7

4. Если $G_q > 0$ или $\varphi_q > \varphi_p$, то интервал, содержащий минимум, найден. В противном случае заменить q на $2q$ и вернуться к шагу 3.

5. Использовать уравнение (2.25) для аппроксимации точки минимума на интервале $(0, q)$ значением r.

6. Если $|d\varphi/dh| = |[\mathbf{g}(\mathbf{x}_0 + r\mathbf{d}|]^T\mathbf{d}| = |G_r| < \varepsilon$, где ε – заданная точность, то остановится.

7. Вернуться на шаг 5, используя интервал $(0, r)$, если $G_r > 0$, либо используя интервал (r, q), если $G_r \leqslant 0$.

На шаге 6 производится проверка значения производной. Предшествующие проверки приводят к остановке тогда, когда положение минимума не изменяется. Следует отметить, что в общем случае проще найти минимум функции, чем положение точки минимума. Последнее определяется с меньшей точностью.

Описанный выше алгоритм реализуется следующей программой:

```
20 PRINT "КУБИЧЕСКАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ"
30 REM В ПРОГРАММЕ ИЩЕТСЯ МИНИМУМ ФУНКЦИИ F(X+LAM*D)
40 REM ВДОЛЬ ПРЯМОЙ X+LAM*D. ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ F(X1,X2,...)
50 REM ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 5000, ГДЕ Z=F(X1,X2,..XN)
60 REM ВЕКТОР-ГРАДИЕНТ ФУНКЦИИ F(X) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ
65 REM 6000 В ВИДЕ G(1),G(2),...G(N)
100 PRINT "ЗАДАЙТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ ":INPUT N
120 DIM X(N),P(N),Q(N),D(N),G(N)
130 CC=0:TT=0
150 PRINT "НАЧАЛЬНАЯ ТОЧКА "
160 FOR I=1 TO N:INPUT X(I):NEXT I
200 PRINT "НАПРАВЛЕНИЕ D"
220 FOR I=1 TO N:INPUT D(I):NEXT I
300 PRINT "ЗАДАЙТЕ ТОЧНОСТЬ E"
310 INPUT E
350 PRINT "ПРЕДПОЛАГАЕМОЕ ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА":INPUT FM
400 PRINT "          ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
410 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):PRINT "X";I,X(I):NEXT I
500 REM ПЕРВАЯ ТОЧКА P
510 GOSUB 5000
520 PRINT "ИТЕРАЦИЯ  ";CC;"  ЗНАЧЕНИЕ  ";Z
530 FP=Z:GOSUB 6000:G1=G0
600 GP=0
610 FOR I=1 TO N:GP=GP+G(I)*D(I):NEXT I
620 IF GP<=0 THEN GOTO 680
625 REM ОПРЕДЕЛИТЬ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ И, ЕСЛИ НЕОБХОДИМО
626 REM ИЗМЕНИТЬ НАПРАВЛЕНИЕ СПУСКА НА ПРОТИВОПОЛОЖНОЕ
630 QX=ABS(2*(FP-FM)/GP):IF QX>1 THEN QX=1
640 FOR I=1 TO N
650 X(I)=P(I0-QX*D(I):P(I)=X(I):NEXT I
660 GOSUB 5000:FP=Z:PRINT "ВОЗМОЖНА НЕСТАБИЛЬНОСТЬ?"
670 GOSUB 6000:G1=G0:GOTO 600
680 QX=ABS(2*(FP-FM)/GP):IF QX>1 THEN QX=1
690 HH=QX
700 REM НАЙТИ СЛЕДУЮЩУЮ ТОЧКУ Q
710 BB=HH
720 FOR I=1 TO N
730 Q(I)=P(I)+BB*D(I):X(I)=Q(I)
740 NEXT I
750 GOSUB 5000:FQ=Z
760 GOSUB 6000:G2=G0
770 GQ=0
780 FOR I=1 TO N
790 GQ=GQ+G(I)*D(I)
800 NEXT I
```

```
810 IF GQ>0 OR FQ>FP THEN GOTO 830
815 REM ВЫПОЛНИТЬ КУБИЧЕСКУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ ИЛИ УДВОИТЬ
816 REM ШАГ ДЛЯ ТОГО, ЧТОБЫ ТОЧКА МИНИМУМА
817 REM ВХОДИЛА В ИНТЕРВАЛ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ
820 HH=2*HH:GOTO 700
830 ZZ=3*(FP-FQ)/HH:ZZ=ZZ+GP+GQ
840 WW=ZZ*ZZ-GP*GQ:IF WW<0 THEN WW=0
850 W=SQR(WW)
860 DD=HH*(1-(GQ+W-ZZ)/(GQ-GP+2*W))
870 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+DD*D(I):NEXT I
880 GOSUB 5000:FR=Z
890 GOSUB 6000:G3=G0
895 REM ВЫЧИСЛИТЬ ГРАДИЕНТ В НОВОЙ ТОЧКЕ
900 GR=0
910 FOR I=1 TO N:GR=GR+G(I)*D(I):NEXT I
920 IF GR>0 THEN GOTO 1000
925 REM НАЙТИ НОВЫЙ ИНТЕРВАЛ И ПРОИЗВЕСТИ ПРОВЕРКУ
927 REM УСЛОВИЯ ОКОНЧАНИЯ ПОИСКА МИНИМУМА
930 IF ABS(GR)<E THEN GOTO 1300
940 HH=BB-DD
950 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):PRINT "X";I,X(I):NEXT I
960 CC=CC+1:PRINT "ИТЕРАЦИЯ  ";CC;"   ЗНАЧЕНИЕ  ";Z
970 FP=Z:GP=GR:G1=G0:GOTO 830
1000 IF ABS(GR)<E THEN GOTO 1300
1005 REM ПОВТОРИТЬ КУБИЧЕСКУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ. НОВЫЙ
1006 REM ИНТЕРВАЛ БУДЕТ BB-DD (СТРОКА 940) ИЛИ
1007 REM DD (СТРОКА 1010)
1010 HH=DD
1020 FOR I=1 TO N:Q(I)=X(I):PRINT "X";I,X(I):NEXT I
1030 CC=CC+1:PRINT "ИТЕРАЦИЯ  ";CC;"   ЗНАЧЕНИЕ";Z
1040 FQ=Z:GQ=GR:G2=G0:GOTO 830
1300 PRINT "МИНИМИЗАЦИЯ ЗАКОНЧЕНА"
1310 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ИТЕРАЦИЙ="CC"ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА="Z
1320 FOR I=1 TO N
1330 PRINT "X";I,X(I)
1340 NEXT I
1350 END
5000 Z=0
5010 Z=100*(X(2)-X(1)*X(1))^2
5020 Z=Z+(1-X(1))^2
5100 TT=TT+1
5200 RETURN
6000 G0=0
6100 G(1)=-400*X(1)*(X(2)-X(1)*X(1))
6110 G(1)=G(1)-2*(1-X(1))
6200 G(2)=200*(X(2)-X(1)*X(1))
7000 FOR I=1 TO N:G0=G0+G(I)*G(I):NEXT I
7010 G0=SQR(G0)
7500 RETURN
```

Пример 1

Найти минимум функции $f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ на прямой, проходящей через точку $(-1;\ 0)$ в направлении $(5;\ 1)$.

Соответствующие подпрограммы начинаются в распечатке с операторов в строках 5000 и 6000. Выбраны значения $E = 0{,}0001$ и $\varphi_m = 0$. Ниже приведена распечатка результатов:

```
КУБИЧЕСКАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
ЗАДАЙТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ  2
НАЧАЛЬНАЯ ТОЧКА
-1
 0

НАПРАВЛЕНИЕ D
 5
 1
```

```
ЗАДАЙТЕ ТОЧНОСТЬ Е
 .0001
ПРЕДПОЛАГАЕМОЕ ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА 0
        ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              -1
X 2               0
ИТЕРАЦИЯ    0    ЗНАЧЕНИЕ    104
X 1              -.3994247
X 2               .1201151
ИТЕРАЦИЯ    1     ЗНАЧЕНИЕ    2.113823
X 1              -.3365114
X 2               .1326977
ИТЕРАЦИЯ    2     ЗНАЧЕНИЕ 1.824123
X 1              -.3413863
X 2               .1317227
ИТЕРАЦИЯ    3     ЗНАЧЕНИЕ    1.822355
X 1               .2422956
X 2               .2484591
ИТЕРАЦИЯ    4     ЗНАЧЕНИЕ    4.174696
X 1               .5813206
X 2               .3162641
ИТЕРАЦИЯ    5     ЗНАЧЕНИЕ .2222494
X 1               .5611688
X 2               .3122338
ИТЕРАЦИЯ    6     ЗНАЧЕНИЕ    .1932893
X 1               .9545786
X 2               .3909157
ИТЕРАЦИЯ    7     ЗНАЧЕНИЕ 27.07376
X 1               .5638282
X 2               .3127656
ИТЕРАЦИЯ    8     ЗНАЧЕНИЕ .1928843
МИНИМИЗАЦИЯ ЗАКОНЧЕНА
КОЛИЧЕСТВО ИТЕРАЦИЙ РАВНО  8 ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА РАВНО  .1928658
X 1               .5633697
X 2               .3126739
```

2.7. ЛИТЕРАТУРА

1 W. C. Davidon, 'Variable metric method for minimisation', *AEC R & D Report*, ANL-5990, Argonne National Laboratory, 1959.

2 R. Fletcher and M. J. D. Powell, 'A rapidly convergent descent method for minimisation', *The Comp Journal*, **6**, 163–168, 1963.

3 J. Kiefer, 'Sequential minimax search for a maximum', *Proc. Am. Math. Soc.*, **4**, 502–506, 1953.

4 M. J. D. Powell, 'An efficient method of finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives', *The Comp. Journal*, **7**, 155–162, 1964

2.8. УПРАЖНЕНИЯ

1. Если $F_0 = 1$ и $F_1 = 1$, а $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$ для $n \geqslant 2$, то покажите, что

$$F_n = \frac{\tau^{n+1} - (-\tau)^{-(n+1)}}{\sqrt{5}},$$

где $\tau = \dfrac{1+\sqrt{5}}{2} \simeq 1{,}618033989.$

Используя это рекуррентное соотношение, покажите, что $F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, F_5 = 8, F_6 = 13, \ldots, F_{10} = 89, \ldots, F_{19} = 6765, F_{20} = 10946.$

2. Покажите, что
   1) $F_{n-1}F_{n-2} - F_nF_{n-3} = (-1)^n$ (см. уравнение (2.4));
   2) $F_n \approx \tau^{n+1}/\sqrt{5}$ для больших n;
   3) $F_{n-1}/F_n \approx 1/\tau$ для больших n.
3. Если расстояние между точками равно по крайней мере ϵ, то 2ε будет наименьшим интервалом неопределенности; следовательно, неравенство $L_n \geqslant 2\varepsilon$ устанавливает границу для n – числа полезных экспериментов. Покажите, что это неравенство приводит к соотношению $\epsilon < L_1/F_{n+1}$.
4. Покажите, что для сокращения интервала неопределенности на 1 % от начальной величины необходимо сделать 11 вычислений функции при использовании методы Фибоначчи. Если размещение точек задать в начале, каково будет минимальное число необходимых точек? (Не рассчитывайте на получение удачных результатов.)
5. Примените метод Фибоначчи при наличии 10 вычислений функции для определения минимума функции $2x^2 + 3e^{-x}$ на интервале (0; 1).
6. Воспользуйтесь методом Фибоначчи для нахождения минимума функции $x^4 - 14x^3 + 60x^2 - 70x$ на интервале (5; 7) с точностью 0,01. Сколько раз необходимо вычислить функцию?
7. Используйте метод "золотого сечения" для определения минимума функции $2x^2 + 3e^{-x}$ с точностью до двух десятичных знаков. В качестве начального интервала неопределенности используйте интервал (0; 1). Сколько раз необходимо вычислить функцию? Сравните с упр. 5.
8. При $\alpha = 0$, $\beta = t$, $\gamma = 2t$ покажите, что δ в уравнении (2.12) примет следующий вид:

$$\delta = \frac{4f_\beta - 3f_\alpha - f_\gamma}{4f_\beta - 2f_\alpha - 2f_\gamma} \cdot t$$

   и что при этом достигается минимум, если $f_\alpha + f_\gamma > 2f_\beta$.
9. Примените квадратичную интерполяцию для определения точки минимума функции $-e^{-x}\ln(x)$ на интервале (1, 3) с точностью 0,001. (Проверьте, не используете ли вы отрицательных значений x, ибо в противном случае получите ошибку при работе программы.)
10. Примените квадратичную интерполяцию для поиска минимума функции $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_1x_2$ на прямой $\boldsymbol{\alpha} + \lambda \mathbf{d}$, где $\boldsymbol{\alpha} = \binom{1}{1}$ и $\mathbf{d} = \binom{2}{3}$, с точностью до двух десятичных знаков.
11. Проверьте справедливость уравнений (2.11), (2.12) и (2.14).
12. Проверьте справедливость уравнения (2.20).
13. Проверьте справедливость уравнений (2.24) и (2.25).
14. Для кривой $y = ax^2$ покажите, что касательная в точке (x', y') пересекает ось x в точке $x'/2$. Подтверждает ли это правильность выбора q в уравнении (2.26)?
15. Решите уравнение $e^x \sin x = 1$. Попытайтесь минимизировать функцию $f(x) = (1 - e^x \sin x)^2$.

3.1. ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ ОБСУЖДЕНИЕ

На разработку методов прямого поиска для определения минимума функций n переменных было затрачено много усилий. Методы прямого поиска являются методами, в которых используются только значения функции. Мы рассмотрим подробно лишь два из них. Практика показала, что эти два метода эффективны и применимы для широкого числа приложений.

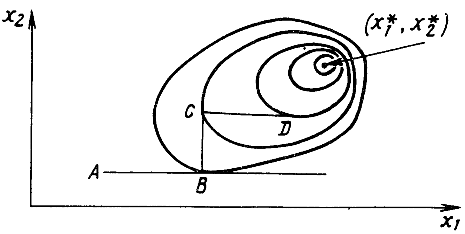

Рис. 3.1

Рассмотрим функцию двух переменных. Ее линии постоянного уровня[1] представлены на рис. 3.1, а минимум лежит в точке (x_1^*, x_2^*). Простейшим методом поиска является метод покоординатного спуска. Из точки A мы производим поиск минимума вдоль направления оси x_1 и, таким образом, находим точку B, в которой касательная к линии постоянного уровня параллельна оси x_1. Затем, производя поиск из точки B в направлении оси x_2, получаем точку C, производя поиск параллельно оси x_1, получаем точку D, и т. д. Таким образом, мы приходим к оптимальной точке. Любой из одномерных методов, описанных в предыдущей главе, может быть использован здесь для поиска вдоль оси. Очевидным образом эту идую можно применить для функций n переменных .

Теоретически данный метод эффективен в случае единственного минимума функции. Но на практике он оказывается слишком медленным. Поэтому были разработаны более сложные методы, использующие больше информации на основании уже полученных значений функции.

Было предложено несколько функций, которые из-за своих свойств являются тестовыми для таких методов. Ниже приведено несколько примеров таких функций.

Функция Розенброка:

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2; \quad \mathbf{x}^* = (1\ ;\ 1). \tag{3.1}$$

Функция Пауэлла:

$$f(\mathbf{x}) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4;$$

$$\mathbf{x}^* = (0;\ 0;\ 0;\ 0). \tag{3.2}$$

[1] Линией постоянного уровня называется кривая в двумерном сечении пространства параметров (в данном случае – в плоскости (x_1, x_2)), значение функции на которой – константа. – *Прим. ред.*

* Имеется в виду ряд значений от 0,1 до 1 с шагом 0,1. – *Прим. ред.*

Двумерная экспоненциальная функция:

$$f(x_1, x_2) = \sum_a [(e^{-ax_1} - e^{-ax_2}) - (e^{-a} - e^{-10a})]^2,$$

где $a = 0, 1\ (0, 1)\ 1^*$; $\mathbf{x}^* = (1\ ;\ 10)$. (3.3)

Любая серьезная оптимизационная процедура должна эффективно решать задачи (3.1), (3.2), (3.3) и другие тестовые задачи.

3.2. МЕТОД ХУКА – ДЖИВСА

Этот метод был разработан в 1961 году, но до сих пор является весьма эффективным и оригинальным. Поиск состоит из последовательности *шагов* исследующего поиска вокруг *базисной точки*, за которой в случае успеха следует *поиск по образцу*.

Описание этой процедуры представлено ниже:

А. Выбрать начальную базисную точку $\mathbf{b}_1$ и шаг длиной h_j для каждой переменной x_j, $j = 1, 2, \ldots, n$. В приведенной ниже программе для каждой переменной используется шаг h, однако указанная выше модификация тоже может оказаться полезной.

Б. Вычислить $f(x)$ в базисной точке $\mathbf{b}_1$ с целью получения сведений о локальном поведении функции $f(x)$. Эти сведения будут использоваться для нахождения подходящего направления поиска по образцу, с помощью которого можно надеяться достичь большего убывания значения функции. Функция $f(x)$ в базисной точке $\mathbf{b}_1$ находится следующим образом:

1. Вычисляется значение функции $f(\mathbf{b}_1)$ в базисной точке $\mathbf{b}_1$.

2. Каждая переменная по очереди изменяется прибавлением длины шага. Таким образом, мы вычисляем значение функции $f(\mathbf{b}_1 + h_1\mathbf{e}_1)$, где $\mathbf{e}_1$ – единичный вектор в направлении оси x_1. Если это приводит к уменьшению значения функции, то $\mathbf{b}_1$ заменяется на $\mathbf{b}_1 + h_1\mathbf{e}_1$. В противном случае вычисляется значение функции $f(b_1 - h_1\mathbf{e}_1)$, и если ее значение уменьшилось, то $\mathbf{b}_1$ заменяем на $\mathbf{b}_1 - h_1\mathbf{e}_1$. Если ни один из проделанных шагов не приводит к уменьшению значения функции, то точка $\mathbf{b}_1$ остается неизменной и рассматриваются изменения в направлении оси x_2, т. е. находится значение функции $f(\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{e}_2)$ и т. д. Когда будут рассмотрены все n переменные, мы будем иметь новую базисную точку $\mathbf{b}_2$.

3. Если $\mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_1$, т. е. уменьшение функции не было достигнуто, то исследование повторяется вокруг той же базисной точки $\mathbf{b}_1$, но с уменьшенной длиной шага. На практике удовлетворительным является уменьшение шага (шагов) в десять раз от начальной длины.

4. Если $\mathbf{b}_2 \neq \mathbf{b}_1$, то производится *поиск* по образцу.

В. При поиске по образцу используется информация, полученная в процессе исследования, и минимизация функции завершается поиском в направлении, заданном образцом. Эта процедура производится следующим образом:

1. Разумно двигаться из базисной точки $\mathbf{b}_2$ в направлении $\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$, поскольку поиск в этом направлении уже привел к уменьшению значения функции. Поэтому вычислим функцию в точке образца

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{b}_1 + 2(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1). \qquad (3.4)$$

В общем случае

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{b}_i + 2(\mathbf{b}_{i+1} - \mathbf{b}_i). \qquad (3.5)$$

2. Затем исследование следует продолжать вокруг точки P_1 ($\mathbf{P}_i$).

3. Если наименьшее значение на шаге В, 2 меньше значения в базисной точке $\mathbf{b}_2$ (в общем случае $\mathbf{b}_{i+1}$), то получают новую базисную точку $\mathbf{b}_3$ ($\mathbf{b}_{i+2}$), после чего следует повторить шаг В, 1. В противном случае не производить поиск по образцу из точки $\mathbf{b}_2$ ($\mathbf{b}_{i+1}$), а продолжить исследования в точке $\mathbf{b}_2$ ($\mathbf{b}_{i+1}$).

Г. Завершить этот процесс, когда длина шага (длины шагов) будет уменьшена до заданного малого значения.

Ниже приведена блок-схема данного метода.

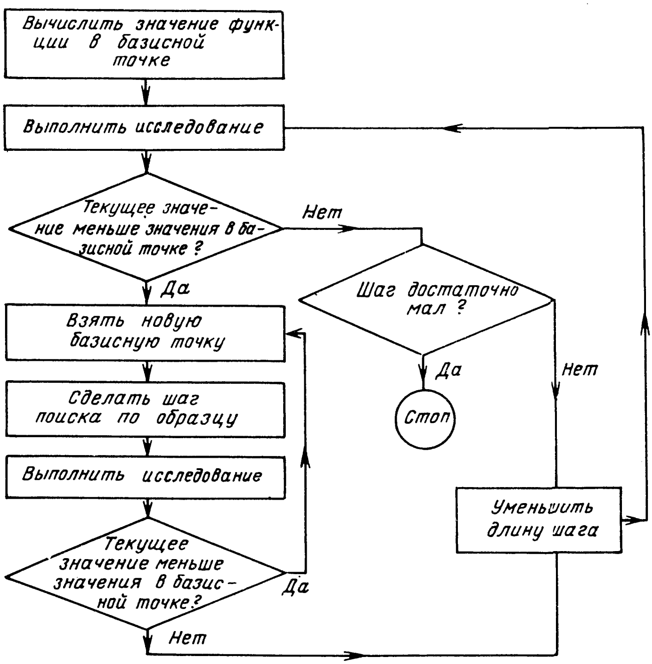

Рис. 3.2

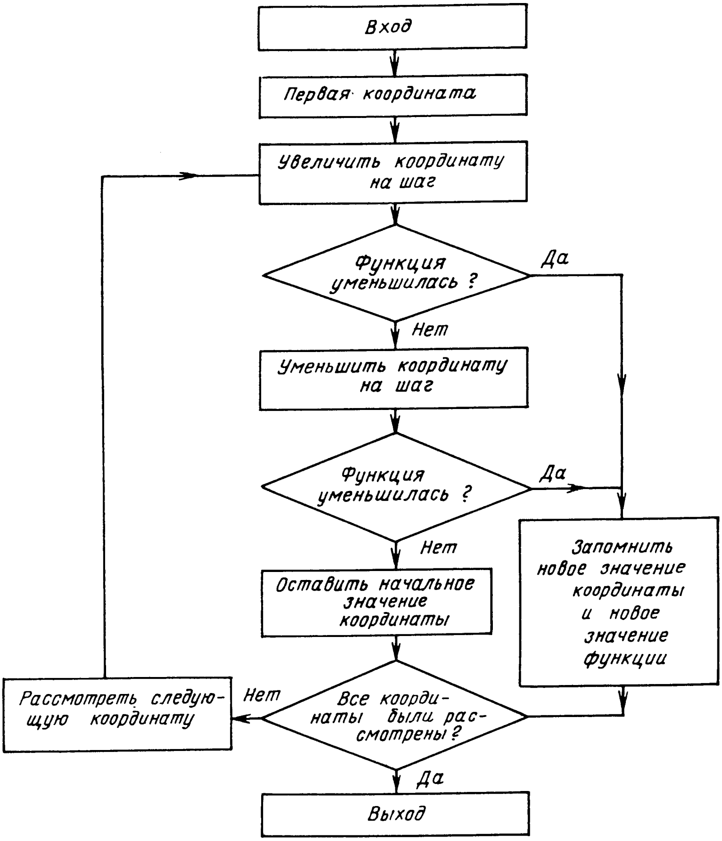

Рис. 3.3

```
10 PRINT "МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА"
20 REM ФУНКЦИЯ ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В ВИДЕ Z=F(X1,X2,...,XN) В СТРОКЕ 2000
30 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
40 DIM X(N),B(N),Y(N),P(N)
50 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...XN"
60 FOR I=1 TO N:INPUT X(I):NEXT I
70 PRINT "ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА":INPUT H
80 K=H:FE=0
90 FOR I=1 TO N
100 Y(I)=X(I):P(I)=X(I):B(I)=X(I):NEXT I
110 GOSUB 2000:FI=Z
120 PRINT "НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ"Z
130 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"    ";:NEXT I:PRINT ""
140 PS=0:BS=1
150 REM ИССЛЕДОВАНИЕ ВОКРУГ БАЗИСНОЙ ТОЧКИ
180 J=1:FB=FI
200 X(J)=Y(J)+K
210 GOSUB 2000
220 IF Z<FI THEN GOTO 280
230 X(J)=Y(J)-K
```

```
240 GOSUB 2000
250 IF Z<FI THEN GOTO 280
260 X(J)=Y(J)
270 GOTO 290
280 Y(J)=X(J)
290 GOSUB 2000
300 FI=Z
310 PRINT "ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК"Z
320 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"   ";:NEXT I:PRINT ""
330 IF J=N THEN GOTO 360
340 J=J+1
350 GOTO 200
360 IF FI<FB-1E-08 THEN GOTO 540
370 REM ПОСЛЕ ОПЕРАТОРА 360, ЕСЛИ ФУНКЦИЯ УМЕНЬШИЛАСЬ,
         ПРОИЗВЕСТИ ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ
380 IF PS=1 AND BS=0 THEN GOTO 420
390 REM НО ЕСЛИ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДИЛОСЬ ВОКРУГ ТОЧКИ ШАБЛОНА PT,
395 REM И УМЕНЬШЕНИЕ ФУНКЦИИ НЕ БЫЛО ДОСТИГНУТО, ТО ИЗМЕНИТЬ БАЗИСНУЮ
         ТОЧКУ В ОПЕРАТОРЕ 420
400 REM В ПРОТИВНОМ СЛУЧАЕ УМЕНЬШИТЬ ДЛИНУ ШАГА В ОПЕРАТОРЕ 490
410 GOTO 490
420 FOR I=1 TO N:P(I)=B(I):Y(I)=B(I):X(I)=B(I):NEXT I
430 GOSUB 2000:BS=1:PS=0
440 FI=Z:FB=Z
450 PRINT "ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ"Z
460 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"   ";:NEXT I:PRINT ""
470 REM (СЛЕДУЕТ ЗА КОММЕНТАРИЕМ В СТРОКЕ 395)
        И ПРОВЕСТИ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОКРУГ НОВОЙ БАЗИСНОЙ ТОЧКИ
480 J=1:GOTO 200
490 K=K/10
500 PRINT "УМЕНЬШИТЬ ДЛИНУ ШАГА"
510 IF K< 1E-08 THEN GOTO 700
520 REM ЕСЛИ ПОИСК НЕ ЗАКОНЧЕН, ТО ПРОИЗВЕСТИ НОВОЕ
525 REM ИССЛЕДОВАНИЕ ВОКРУГ НОВОЙ БАЗИСНОЙ ТОЧКИ
530 J=1:GOTO 200
535 REM ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ
540 FOR I=1 TO N:P(I)=2*Y(I)-B(I)
550 B(I)=Y(I):X(I)=P(I):Y(I)=X(I)
560 NEXT I
570 GOSUB 2000:FB=FI:PS=1:BS=0:FI=Z
580 PRINT "ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ"Z
590 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"   ";:NEXT I:PRINT ""
600 REM ПОСЛЕ ЭТОГО ПРОИЗВЕСТИ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОКРУГ
        ПОСЛЕДНЕЙ ТОЧКИ ОБРАЗЦА
610 J=1:GOTO 200
700 PRINT "        МИНИМУМ НАЙДЕН"
710 FOR I=1 TO N:PRINT "X"I"="P(I):NEXT I:PRINT ""
750 PRINT "МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН "FB
760 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО "FE
790 END
2000 Z=(X(1)-2)^2+(X(2)-5)^2+(X(3)+2)^4
2010 FE=FE+1
2020 REM СЧЕТЧИК КОЛИЧЕСТВА ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ
2030 RETURN
```

Приведенная выше программа реализует описанную процедуру. Одной или двух точек бывает недостаточно для определения начальной точки. Первая точка всегда должна выбираться осмотрительно. ЭВМ работает только с *ограниченной* точностью, и ошибки могут накапливаться в процессе сложных вычислений, особенно если шаг имеет "неудобную" длину. (Обычно мы будем избегать "неудобной" длины, но программа должна быть работоспособна и в таких ситуациях.) Поэтому в строке 360, где выясняется вопрос об изменении базисной точки, мы избегаем уменьшения длины шага из-за накапливания ошибки введением длины шага, равной 10^{-8}. Мы отслеживаем, где производится исследование – в базисной точке (BS = 1, PS = 0) или в точке образца (BS = 0, PS = 1). Как можно убедиться на практике, если не принимаются такие меры предосторожности даже программа с удовлетворительной логикой будет неработоспособна.

В приведенной программе минимальная длина шага равна 10^{-8}, но она может быть изменена (например, в строке 510). Для контроля за выполнением процедуры в программу введена печать промежуточных результатов. Для увеличения скорости счета могут быть удалены строки с номерами 120, 130, 310, 320, 450, 460, 500, 580, 590.

Подпрограмма, начинающаяся со строки 2000, вычисляет значение минимизируемой функции

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 5)^2 + (x_3 + 2)^4.$$

Минимум, очевидно, находится в точке (2 ; 5 ; –2). Для начальной точки (4 ; –2 ; 3) и начального шага длиной 1 приведены некоторые промежуточные результаты. По ним можно легко проследить за изменениями в ходе исследований и поиска по образцу. Заметим, что значение 97,0000001 ($0^2 + 4^2 + 3^4 = 97$) является значением функции в точке, полученной ранее. Количество выполненных вычислений функции запоминается в счетчике. Это часто используется как средство сравнения эффективности различных методов поиска. Чем лучше метод, тем меньше в общем случае требуется вычислений значений функции.

```
МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ 3
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XN  4 -2  3
ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА  1
НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ  678
 4    -2    3
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 675
 3    -2    3
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 662
 3    -1    3
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 293
 3    -1    2
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 106
 2    0     1
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 106
 2    0     1
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 97
 2    1     1
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 32
 2    1     0
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 5
 1    3    -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 4
 2    3    -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 1
 2    4    -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 1
 2    4    -2
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 20
 2    7    -4
```

```
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 20
 2      7     -4
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 17
 2      6     -4
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 2
 2      6     -3
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 1
 2      4     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 1
 2      4     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1
 2      6     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 1
 2      6     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
УМЕНЬШИТЬ ДЛИНУ ШАГА
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0

ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
ИССЛЕДУЮЩИЙ ПОИСК 0
 2      5     -2
УМЕНЬШИТЬ ДЛИНУ ШАГА
        МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = 2
X 2 = 5
X 3 =-2

МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  0
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  127
```

3.3. МЕТОД НЕЛДЕРА – МИДА

Метод Нелдера – Мида[1] является развитием симплексного метода Спендли, Хекста и Химсворта. Множество $(n + 1)$-й равноудаленной точки в n-мерном пространстве называется регулярным симплексом. Эта конфигурация рассматривается в методе Спендли, Хекста и Химсворта. Следовательно, в двумерном пространстве симплексом является равносторонний треугольник, а в трехмерном пространстве – правильный тетраэдр. Идея метода состоит в сравнении значений функции в $(n + 1)$ вершинах симплекса и перемеще-

[1] Называется также поиском по деформируемому многограннику. – *Прим. ред.*

нии симплекса в направлении оптимальной точки с помощью итерационной процедуры. В симплексном методе, предложенном первоначально, регулярный симплекс использовался на каждом этапе. Нелдер и Мид предложили несколько модификаций этого метода, допускающих, чтобы симплексы были неправильными. В результате получился очень надежный метод прямого поиска, являющийся одним из самых эффективных, если $n \leqslant 6$.

В методе Спендли, Хекста и Химсворта симплекс перемещается с помощью трех основных операций: *отражения, растяжения* и *сжатия*. Смысл этих операций станет понятным при рассмотрении шагов процедуры.

А. Найдем значения функции

$$f_1 = f(\mathbf{x}_1),\ f_2 = f(\mathbf{x}_2)\ \ldots\ f_{n+1} = f(\mathbf{x}_{n+1})$$

в вершинах симплекса.

Б. Найдем наибольшее значение функции f_h, следующее за наибольшим значением функции f_g, наименьшее значение функции f_l и соответствующие им точки $\mathbf{x}_h$, $\mathbf{x}_g$ и $\mathbf{x}_l$.

В. Найдем центр тяжести всех точек, за исключением точки $\mathbf{x}_h$. Пусть центром тяжести будет

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq h} \mathbf{x}_i \qquad (3.6)$$

и вычислим $f(\mathbf{x}_0) = f_0$.

Г. Удобнее всего начать перемещение от точки $\mathbf{x}_h$. Отразив точку $\mathbf{x}_h$ относительно точки $\mathbf{x}_0$, получим точку $\mathbf{x}_r$ и найдем $f(\mathbf{x}_r) = f_r$.

Операция отражения иллюстрируется рис. 3.4. Если $\alpha > 0$ – коэффициент отражения, то положение точки $\mathbf{x}_r$ определяется следующим образом:

$$\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_0 = \alpha(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_h),$$

т. е.

$$\mathbf{x}_r = (1 + \alpha)\mathbf{x}_0 - \alpha \mathbf{x}_h. \qquad (3.7)$$

Замечание. $\alpha = |\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_0| / |\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_h|$.

Д. Сравним значения функций f_r и f_l.

1. Если $f_r < f_l$, то мы получили наименьшее значение функции. Направление из точки $\mathbf{x}_0$ в точку $\mathbf{x}_r$ наиболее удобно для перемещения. Таким образом, мы производим растяжение в этом направлении и находим точку $\mathbf{x}_e$ и значение функции $f_e = f(\mathbf{x}_e)$. Рисунок 3.5 иллюстрирует операцию растяжения симплекса. Коэффициент растяжения $\gamma > 1$ можно найти из следующих соотношений:

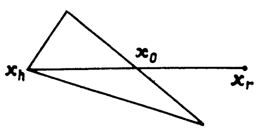

Рис. 3.4

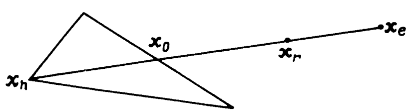

Рис. 3.5

$x_e - x_0 = \gamma(x_r - x_0)$,

т. е.

$$x_e = \gamma x_r + (1-\gamma)x_0. \qquad (3.8)$$

Замечание. $\gamma = |x_e - x_0|/|x_r - x_0|$.

а) Если $f_e < f_l$, то заменяем точку x_h на точку x_e и проверяем $(n + 1)$-ую точку симплекса на сходимость к минимуму (см. шаг З). Если сходимость достигнута, то процесс останавливается; в противном случае возвращаемся на шаг Б.

б) Если $f_e \geqslant f_l$, то отбрасываем точку x_e. Очевидно, мы переместились слишком далеко от точки x_0 к точке x_r. Поэтому следует заменить точку x_h на точку x_r, в которой было получено улучшение (шаг Д, 1), проверить сходимость и, если она не достигнута, вернуться на шаг Б.

2. Если $f_r > f_l$, но $f_r \leqslant f_g$, то x_r является лучшей точкой по сравнению с другими двумя точками симплекса и мы заменяем точку x_h на точку x_r и, если сходимость не достигнута, возвращаемся на шаг Б, т. е. выполняем пункт 1, б, описанный выше.

3. Если $f_r > f_l$ и $f_r > f_g$, то перейдем на шаг Е.

Е. Сравним значения функций f_r и f_h.

1. Если $f_r > f_h$, то переходим непосредственно к шагу сжатия Е, 2.
Если $f_r < f_h$, то заменяем точку x_h на точку x_r и значение функции f_h на значение функции f_r. Запоминаем значение $f_r > f_g$ из шага Д, 2, приведенного выше. Затем переходим на шаг Е, 2.

2. В этом случае $f_r > f_h$, поэтому ясно, что мы переместились слишком далеко от точки x_h к точке x_0. Попытаемся исправить это, найдя точку x_c (а затем f_c) с помощью шага сжатия, показанного на рис. 3.6.

Если $f_r > f_h$, то сразу переходим к шагу сжатия и находим точку x_c из соотношения

$x_c - x_0 = \beta(x_h - x_0)$,

где β $(0 < \beta < 1)$ – коэффициент сжатия. Тогда

$$x_c = \beta x_h + (1-\beta)x_0. \qquad (3.9)$$

Если $f_r < f_h$, то сначала заменим точку x_h на точку x_r, а затем произведем сжатие. Тогда точку x_c найдем из соотношения

$x_c - x_0 = \beta(x_r - x_0)$,

т. е.

$$x_c = \beta x_r + (1-\beta)x_0 \qquad (3.10)$$

(рис. 3.7).

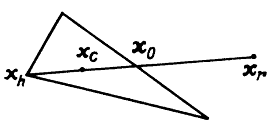

Рис. 3.6

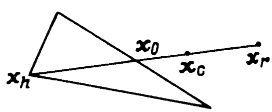

Рис. 3.7

Ж. Сравним значения функций f_c и f_h.

1. Если $f_c < f_h$, то заменяем точку $\mathbf{x}_h$ на точку $\mathbf{x}_c$, и если сходимость не достигнута, то возвращаемся на шаг Б.
2. Если $f_c > f_h$, то очевидно, что все наши попытки найти значение меньшее f_h закончились неудачей, поэтому мы переходим на шаг З.

З. На этом шаге мы уменьшаем размерность симплекса делением пополам расстояния от каждой точки симплекса до $\mathbf{x}_l$ – точки, определяющей наименьшее значение функции.

Таким образом, точка x_i заменяется на точку $x_i + ½(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_l)$, т. е. заменяем точку $\mathbf{x}_i$ точкой

$$½(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_l). \tag{3.11}$$

Затем вычисляем f_i для $i = 1, 2, \ldots, (n + 1)$, проверяем сходимость и, если она не достигнута, возвращаемся на шаг В.

И. Проверка сходимости основана на том, чтобы стандартное отклонение $(n + 1)$-го значения функции было меньше некоторого заданного малого значения ϵ. В этом случае вычисляется

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n+1} (f_i - \bar{f})^2/(n + 1) \tag{3.12}$$

где $\bar{f} = \Sigma f_i/n + 1$.

Если $\sigma < \epsilon$, то все значения функции очень близки друг к другу, и поэтому они, возможно, лежат вблизи точки минимума функции $\mathbf{x}_l$. Исходя из этого такой критерий сходимости является разумным, хотя Бокс, Дэвис и Свенн [1] предлагают то, что они считают более "безопасной" проверкой.

Шаги этой процедуры представлены в виде блок-схемы на рис. 3.8.

Коэффициенты α, β, γ в вышеприведенной процедуре являются соответственно коэффициентами отражения, сжатия и растяжения. Нелдер и Мид рекомендуют брать $\alpha = 1$, $\beta = 0,5$ и $\gamma = 2$. Рекомендация основана на результатах экспериментов с различными комбинациями значений. Эти значения параметров позволяют методу быть эффективным, но работать в различных сложных ситуациях.

Начальный симплекс выбирается на наше усмотрение. В данной программе точка $\mathbf{x}_1$ является начальной точкой, затем в программе формируются точки

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_2 &= \mathbf{x}_1 + k\mathbf{e}_1 \\ \mathbf{x}_3 &= \mathbf{x}_1 + k\mathbf{e}_2 \\ \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_1 + k\mathbf{e}_n \end{aligned} \tag{3.13}$$

где k – произвольная длина шага, а $\mathbf{e}_j$ – единичный вектор.

Обозначения, используемые в программе, в целом соответствуют обозначениям, приведенным в тексте, за исключением того, что используются прописные буквы FE $\equiv f_e$, XC $\equiv \mathbf{x}_c$ и т. д. Вершины симплекса обозначаются S. При этом S(I, J) является J-й компонентой I-й вершины, т. е.

$$S(I, J) \equiv x_{ij}. \tag{3.14}$$

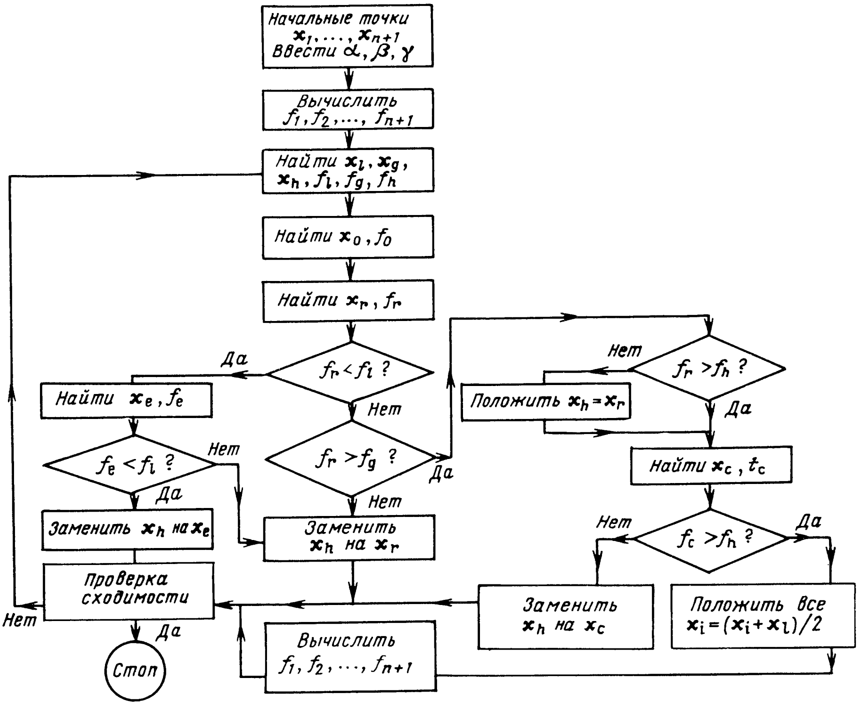

Рис. 3.8

Программа соответствует блок-схеме, и это легко проследить, читая ее вместе с операторами PRINT, сопровождающими ввод, и операторами REM. В распечатке программы в строке 5000 содержится начало подпрограммы, вычисляющей минимизируемую функцию Пауэлла (см. уравнение (3.2)).

Отметим, что при проверке сходимости (строки 2060 – 2180 программы) используется хорошо известное соотношение

$$\sum_{i=1}^{n+1} (f_i - \bar{f})^2 = \sum_{i=1}^{n+1} f_i^2 - (n+1)\,\bar{f}^2 \tag{3.15}$$

для вычисления стоящей слева величины.

Распечатка программы приведена ниже.

```
20 PRINT "СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД НЕЛДЕРА-МИДА"
40 PRINT ""
60 PRINT "ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000"
80 PRINT "":TEV=0
100 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ"
120 INPUT N
140 PRINT "НАЧАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ"
160 DIM S(N+1,N)
180 FOR J=1 TO N
```

```
200 INPUT S(1,J)
220 NEXT J
240 PRINT "ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА"
260 INPUT K
270 REM ПОСТРОИТЬ ПЕРВЫЙ СИМПЛЕКС ВОКРУГ НАЧАЛЬНОЙ ТОЧКИ"
280 FOR I=2 TO N+1
300 FOR J=1 TO N
320 IF J=I-1 THEN S(I,J)=S(1,J)+K:GOTO 360
340 S(I,J)=S(1,J)
360 NEXT J
380 NEXT I
400 PRINT "ВВЕДИТЕ ALFA,BETA,GAMMA"
420 INPUT AL,BE,GA
440 DIM X(N),XH(N),XG(N),XL(N),XO(N)
460 DIM XR(N),XC(N),XE(N),F(N+1)
470 REM ВЫЧИСЛИТЬ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ
480 FOR I=1 TO N+1
500 FOR J=1 TO N
520 X(J)=S(I,J)
540 NEXT J
560 GOSUB 5000
580 F(I)=Z
600 NEXT I
610 REM НАЙТИ НАИБОЛЬШЕЕ И НАИМЕНЬШЕЕ ЗНАЧЕНИЯ
615 REM ФУНКЦИИ И СООТВЕСТВУЮЩИЕ ИМ ТОЧКИ
620 FH=-1E+20:FL=1E+20
640 FOR I=1 TO N+1
660 IF F(I)>FH THEN FH=F(I):H=I
680 IF F(I)<FL THEN FL=F(I):L=I
700 NEXT I
710 REM НАЙТИ ВТОРОЕ НАИБОЛЬШЕЕ ЗНАЧЕНИЕ И
715 REM СООТВЕТСТВУЮЩУЮ ЕМУ ТОЧКУ
720 FG=-1E+20
740 FOR I=1 TO N+1
760 IF I=H THEN GOTO 800
780 IF F(I)>FG THEN FG=F(I):G=I
800 NEXT I
820 FOR J=1 TO N
840 XO(J)=0
860 FOR I=1 TO N+1
880 IF I=H THEN GOTO 910
900 XO(J)=XO(J)+S(I,J)
910 NEXT I
920 REM ОПРЕДЕЛИТЬ ТОЧКИ XO,XH,XG,XL
940 XO(J)=XO(J)/N
960 XH(J)=S(H,J)
980 XG(J)=S(G,J)
1000 XL(J)=S(L,J)
1020 NEXT J
1040 FOR J=1 TO N
1060 X(J)=XO(J)
1080 NEXT J
1100 GOSUB 5000
1120 FO=Z:PRINT "ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120"
1130 REM ДАЛЕЕ ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ
1140 FOR J=1 TO N
1160 XR(J)=XO(J)+AL*(XO(J)-XH(J))
1180 X(J)=XR(J)
1200 NEXT J
1220 GOSUB 5000:FR=Z:PRINT "ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220  ";Z
1230 REM ЕСЛИ FR<FL, ТО ПРОИЗВОДИТСЯ РАСТЯЖЕНИЕ
1240 IF FR<FL THEN GOTO 1300
1250 REM ЕСЛИ FR>FL И FR>FG, ТО ПРОВЕРИТЬ FR И FH
1255 REM В ПРОТИВНОМ СЛУЧАЕ, ЗАМЕНИТЬ XH НА XR
1260 IF FR>FG THEN GOTO 1600
```

```
1280 GOTO 1520
1290 REM ДАЛЕЕ ВЫПОЛНЯЕТСЯ РАСТЯЖЕНИЕ
1300 FOR J=1 TO N
1320 XE(J)=GA*XR(J)+(1-GA)*XO(J)
1340 X(J)=XE(J)
1360 NEXT J
1380 GOSUB 5000:FE=Z
1400 IF FE<FL THEN GOTO 1440
1420 GOTO 1520
1440 FOR J=1 TO N
1460 S(H,J)=XE(J)
1480 NEXT J:F(H)=FE:PRINT "ВЫПОЛНИТЕ РАСТЯЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1480  ";Z
1490 REM ПРОВЕРИТЬ СХОДИМОСТЬ В СТРОКЕ 2060
1500 GOTO 2060
1520 FOR J=1 TO N
1540 S(H,J)=XR(J)
1560 NEXT J:F(H)=FR:PRINT "ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1560"
1580 GOTO 2060
1600 IF FR>FH THEN GOTO 1700
1620 FOR J=1 TO N
1640 XH(J)=XR(J)
1660 NEXT J
1680 F(H)=FR
1690 REM ДАЛЕЕ СЛЕДУЕТ СЖАТИЕ
1700 FOR J=1 TO N
1720 XC(J)=BE*XH(J)+(1-BE)*XO(J)
1740 X(J)=XC(J)
1760 NEXT J
1780 GOSUB 5000:FC=Z
1800 IF FC>FH THEN GOTO 1920
1820 FOR J=1 TO N
1840 S(H,J)=XC(J)
1860 NEXT J
1880 F(H)=FC:PRINT "ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880  ";Z
1900 GOTO 2060
1910 REM ДАЛЕЕ СЛЕДУЕТ РЕДУКЦИЯ СИМПЛЕКСА
1920 FOR I=1 TO N+1
1940 FOR J=1 TO N
1960 S(I,J)=(S(I,J)+XL(J))/2
1980 X(J)=S(I,J)
2000 NEXT J
2020 GOSUB 5000:F(I)=Z
2040 NEXT I:PRINT "ВЫПОЛНИТЕ РЕДУКЦИЮ В СТРОКЕ 2040"
2050 REM ДАЛЕЕ СЛЕДУЕТ ПРОВЕРКА СХОДИМОСТИ
2060 S1=0:S2=0
2080 FOR I=1 TO N+1
2100 S1=S1+F(I)
2120 S2=S2+F(I)*F(I)
2140 NEXT I
2160 SIG=S2-S1*S1/(N+1):SIG = SIG/(N+1)
2180 IF SIG<1E-10 THEN GOTO 2220
2200 GOTO 620
2220 PRINT "МИНИМУМ НАЙДЕН В ТОЧКЕ "
2240 FOR J=1 TO N
2260 PRINT "X";J;"  =";XL(J)
2280 NEXT J:PRINT ""
2300 PRINT "ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА ФУНКЦИИ="F(L)
2320 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ="TEV
2340 END
5000 Z=(X(1)+10*X(2))^2+5*(X(3)-X(4))^2
5020 Z=Z+(X(2)-2*X(3))^4
5040 Z=Z+10*(X(1)-X(4))^4
5060 TEV=TEV+1
5100 RETURN
```

Пример 1

Использовать метод Нелдера – Мида для минимизации функции Розенброка $f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$. Положив $k = 0{,}5$ и выбрав в качестве начального приближения точку (1,5; 2), и для коэффициента сжатия использовать значения $\alpha = 1$, $\beta = 0{,}5$ и $\gamma = 2$.

При правильном изменении строки 5000 в подпрограмме начало и конец распечатки результатов выглядят так, как это представлено ниже. При этом достаточно просто можно проследить за работой процедуры. Вывод на печать в строках 1120, 1220, 1480, 1560, 2040 можно "подавить", и это повысит скорость выполнения программы.

Истинный минимум имеет значение 0 в точке (1; 1).

```
СИМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД НЕЛДЕРА-МИДА

ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000

ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ  2
НАЧАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ  1.5  2
ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА  .5
ВВЕДИТЕ ALFA,BETA,GAMMA  1   .5          2
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   225
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   66.07813
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   88.45312
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   17.93848
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   20.92285
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   4.80719
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   51.29157
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   .2411101
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   .3819754
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1560
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   7.327366
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   1.094459
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   6.877291E-05
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1560
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   1.433001E-04
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   2.787633E-05
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   3.54833E-05
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   8.852308E-06
ВЫЧИСЛИТЕ ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ В СТРОКЕ 1120
ВЫПОЛНИТЕ ОТРАЖЕНИЕ В СТРОКЕ 1220   2.155905E-05
ВЫПОЛНИТЕ СЖАТИЕ В СТРОКЕ 1880   5.518512E-06
МИНИМУМ НАЙДЕН В ТОЧКЕ
X 1   = 1.000634
X 2   = 1.001357

ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА ФУНКЦИИ РАВНО  1.194424E-06
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  108
```

3.4. ЛИТЕРАТУРА

1 M. J. Box, D. Davies and W. H. Swann, *Non-linear Optimisation Techniques*, ICI Ltd. Monograph No. 5, Oliver and Boyd, 1969.

2 R. Hooke and T. A. Jeeves, 'Direct search solution of numerical and statistical problems' *J. Assn. Comp. Mach.*, **8**, 212–229, 1961.

3 J. A. Nelder and R. Mead, 'A simplex method for function minimisation', *The Comp. Journal*, **7**, 308–313, 1965.
4 M. J. D. Powell, 'An iterative method for finding stationary values of a function of several variables', *The Comp. Journal*, **5**, 147–151, 1962.
5 H. H. Rosenbrock, 'An automatic method for finding the greatest or least value of a function', *The Comp. Journal*, **3**, 175–184, 1960.
6 W. Spendley, G. R. Hext and F. R. Himsworth, 'Sequential applications of simplex designs in optimisation and evolutionary operation', *Technometrics*, **4**, 441–461, 1962.

3.5. УПРАЖНЕНИЯ

1. Попробуйте написать программу на языке Бейсик, реализующую метод покоординатного спуска. Можете применить в качестве подпрограммы для этого метода любой из алгоритмов одномерного поиска для функции одной переменной, приведенных в гл. 2.
2. Используйте программу, написанную вами в п. 1 упражнений для поиска минимума функции $(x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 + (x_3 - 3)^2$ и функции Розенброка $100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$.
3. Воспользуйтесь программой, реализующей метод Хука – Дживса для минимизаций функций. Сравните количество вычислений функции, потребовавшихся в этом случае и в случае метода покоординатного спуска.
4. Повторите упр. 2 и упр. 3 с разными начальными точками.
5. Модифицируйте метод Нелдера – Мида, заменив коэффициент, уменьшающий длину шага, т. е. вместо 10 используйте (а) 2, (б) 4, (в) 8, (г) 100. Выполните повторно упр. 2 и упр. 3. Сравните количество вычислений функции, необходимых для достижения конечного результата.
6. Используя программу Нелдера – Мида, минимизируйте функцию Розенброка, функцию Пауэлла, двумерную экспоненциальную функцию (уравнения (3.1) – (3.3)). Используйте различные начальные значения и сравните количество вычислений функции. Особенно неудобными для минимизации являются точки (–1,2; 1) для функции Розенброка и (3; –1; 0; 1) для функции Пауэлла.
7. Ознакомьтесь с работой Бокса, Дэвиса и Свена, используйте предложенную ими проверку сходимости в программе Нелдера – Мида и примените результаты к функциям, упомянутым в упр. 6.
8. Модифицируйте программу Нелдера – Мида, используя различные значения для α, β и γ. Проведите оценку получающихся результатов. Ознакомьтесь со статьей [3] и с замечаниями по этому вопросу.
9. Ознакомьтесь с работой [6]. Напишите программу на языке Бейсик, реализующую метод Спендли, Хекста и Химсворта, и примените ее на практике. Чем она отличается от программы Нелдера – Мида в отношении требуемого количества вычислений функции?
10. Минимизируйте функцию

$$f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^4 + 2x_1^2x_2^2 - 4x_1 + 3.$$

11. Минимизируйте функцию

$$\varphi(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2.$$

12. Решите уравнения

$$x_1^2 + x_2 = 11,$$
$$x_1 + x_2^2 = 7.$$

Как можно использовать упр. 11, чтобы помочь в решении этих уравнений?

13. Решите систему уравнений

$$x + y + z = 6,$$
$$x^2 + y^2 + z^2 = 14,$$
$$x^3 + y^3 + z^3 = 36.$$

14. Переменные F и C связаны соотношением $F = a + bC$, но при измерении величины F появляется ошибка.

Определите значения a и b по следующим данным:

F	51	68	84	103	121	141
C	10	20	30	40	50	60

Используйте принцип наименьших квадратов и найдите a и b по результатам минимизации функции

$$S = \sum_{i=1}^{6} (F_i - a - bC_i)^2.$$

Это – простая задача линейной регрессии. Данный вопрос рассматривается во многих книгах по элементарной статистике, существуют формулы, по которым легко вычислить a и b. Проверьте полученный вами ответ, используя эти результаты.

15. Известно, что переменные Q и h связаны соотношением (обусловленным ошибкой в измерении Q) $Q = ah^n$, где a и n – постоянные.

Используя приведенные ниже данные, покажите, что это соотношение имеет смысл, и получите значения a и n:

h	4	6	8	10	12
Q	650	1740	3640	6360	9790

Замечание. Если $Q = ah^n$, то $\ln(Q) = \ln(a) + n \ln(h)$. Таким образом, можно привести настоящую задачу к задаче линейной регрессии с преобразованными переменными $\ln(Q)$ и $\ln(h)$. Решите ее с помощью преобразования и без него, основываясь на принципе наименьших квадратов, т. е. минимизируйте функции

1) $S_1 = \Sigma\,[\ln(Q_i) - \ln(a) - n\ln(h_i)]^2$,
2) $S_2 = \Sigma\,(Q_i - ah_i^n)^2$,

изменяя значения a и n. Получились ли ответы одинаковыми?

ГЛАВА 4. ГРАДИЕНТНЫЕ МЕТОДЫ

4.1. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА

В этой главе рассматриваются методы поиска, в которых наряду со значениями функции используется и ее градиент. С помощью упомянутого в разд. 3.1 метода покоординатного спуска осуществляется поиск из заданной точки в направлении, параллельном одной из осей, до точки минимума в данном направлении. Затем поиск производится в направлении, параллельном другой оси, и т. д. Направления, конечно, фиксированы. Кажется разумным попытаться модифицировать этот метод таким образом, чтобы на каждом этапе поиск точки минимума производился вдоль "наилучшего" направления. Не ясно, какое направление является "наилучшим", но известно, что направление градиента является направлением наискорейшего возрастания функции. Следовательно, противоположное направление является направлением наискорейшего убывания функции.

Это свойство может быть обосновано следующим образом. Предположим, что осуществляется перемещение из точки $\mathbf{x}$ в следующую точку $\mathbf{x} + h\mathbf{d}$, где $\mathbf{d}$ – некоторое направление, а h – шаг некоторой длины. Следовательно, перемещение производится из точки $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ в точку $(x_1 + \delta x_1, x_2 + \delta x_2, \ldots, x_n + \delta x_n)$, где

$$\delta x_i = h d_i, \tag{4.1}$$

а d_i – косинусы направления $\mathbf{d}$, такие, что

$$\sum_{i=1}^{n} d_i^2 = 1. \tag{4.2}$$

Изменение значений функции определяется соотношениями

$$\mathrm{d}f = f(x_1 + \delta x_1, x_2 + \delta x_2, \ldots, x_n + \delta x_n) - f(x_1, x_2, \ldots, x_n) =$$

$$= \frac{\partial f}{\partial x_1}\delta x_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}\delta x_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}\delta x_n \tag{4.3}$$

с точностью до первого порядка δx_i, причем частные производные вычисляются в точке $\mathbf{x}$ (в соответствии с уравнением (1.4)). Как следует выбрать направления d_i, удовлетворяющие уравнению (4.2), чтобы получить наибольшее значение изменения функции $\mathrm{d}f$?

Здесь возникает задача максимизации с ограничением, и для ее решения предвосхитим здесь результаты следующей главы, используя метод множителей Лагранжа, с помощью которого определим функцию

$$\varphi(d_1, d_2, \ldots, d_n) = \mathrm{d}f + \lambda(\Sigma d_i^2 - 1).$$

Величина $\mathrm{d}f$, удовлетворяющая ограничению (4.2), достигает максимума, когда функция

$$\varphi(d_1, d_2, \ldots, d_n) = h\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}d_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2}d_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}d_n\right) + \lambda(d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_n^2 - 1)$$

достигает максимума. Ее производная

$$\frac{\partial \varphi}{\partial d_j} = h\frac{\partial f}{\partial x_j} + 2\lambda d_j, \quad \text{при} \quad j = 1, 2, \ldots, n. \tag{4.4}$$

Если

$$\frac{\partial \varphi}{\partial d_j} = 0, \quad \text{то} \quad d_j = -\frac{h}{2\lambda}\frac{\partial f}{\partial x_j}. \tag{4.5}$$

Следовательно,

$$\frac{d_1}{\dfrac{\partial f}{\partial x_1}} = \frac{d_2}{\dfrac{\partial f}{\partial x_2}} = \cdots = \frac{d_n}{\dfrac{\partial f}{\partial x_n}}. \tag{4.6}$$

Тогда $d_i \sim \partial f/\partial x_i$ и направление $\mathbf{d}$ параллельно направлению $\nabla f(\mathbf{x})$ в точке $\mathbf{x}$.

Таким образом, наибольшее *локальное* возрастание функции для заданного *малого* шага h имеет место, когда $\mathbf{d}$ есть направление $\nabla f(\mathbf{x})$ или $\mathbf{g}(\mathbf{x})$. Поэтому направлением наискорейшего спуска является направление

$$-\nabla f(\mathbf{x}) \text{ или } -\mathbf{g}(\mathbf{x}). \tag{4.7}$$

В более простом виде уравнение (4.3) можно записать так:

$$\mathrm{d}f = |\nabla f(\mathbf{x})|\,|\mathrm{d}\mathbf{x}|\cos\theta,$$

где θ – угол между векторами $\nabla f(\mathbf{x})$ и $\mathrm{d}\mathbf{x}$. Для заданной величины $\mathrm{d}\mathbf{x}$ мы минимизируем $\mathrm{d}f$, выбирая $\theta = 180°$, чтобы направление $\mathrm{d}\mathbf{x}$ совпадало с направлением $-\nabla f(\mathbf{x})$.

Замечание. Направление градиента перпендикулярно в любой точке линии постоянного уровня, поскольку вдоль этой линии функция постоянна. Таким образом, если $(d_1, d_2, \ldots, d_n)$ – *малый* шаг вдоль линии уровня, то

$$f(x_1 + d_1, x_2 + d_2, \ldots, x_n + d_n) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

и, следовательно,

$$\mathrm{d}f = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j} d_j = [\nabla f(\mathbf{x})]^{\mathrm{T}} \mathbf{d} = 0. \tag{4.8}$$

(рис. 4.1).

В методе наискорейшего спуска желательно использовать рассмотренное свойство направления градиента. Поэтому, если мы находимся в точке $\mathbf{x}_i$ на некотором шаге процесса оптимизации, то поиск минимума функции осуществляется вдоль направления $-\nabla f(\mathbf{x}_i)$. Данный метод является итерационным. На шаге i точка минимума аппроксимируется точкой $\mathbf{x}_i$. Следующей аппроксимацией является точка

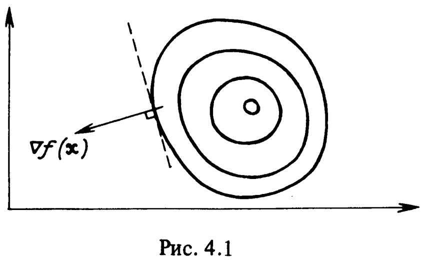

Рис. 4.1

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \lambda_i \nabla f(\mathbf{x}_i), \tag{4.9}$$

где λ_i – значение λ, минимизирующее функцию

$$\varphi(\lambda) = f[\mathbf{x}_i - \lambda \nabla f(\mathbf{x}_i)]. \tag{4.10}$$

Значение λ_i может быть найдено с помощью одного из методов одномерного поиска, описанных в гл. 2. Блок-схема метода наискорейшего спуска приведена на рис. 4.2.

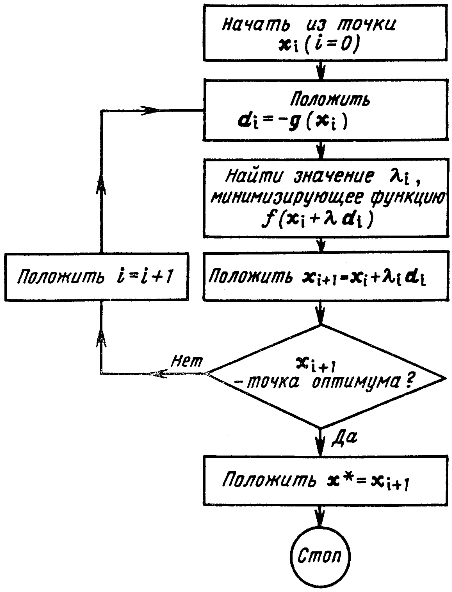

Рис. 4.2

```
20 PRINT "МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА"
40 PRINT "ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 2000"
60 PRINT "ЧАСТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ G(1),G(2),...,G(N) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 3000"
80 PRINT "ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ПРОИЗВОДИТСЯ МЕТОДОМ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ"
100 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
120 DIM X(N),Y(N),G(N),D(N),L(4),FF(4)
140 REM МАССИВЫ L(4) И FF(4) ИСПОЛЬЗУЮТСЯ ПРИ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ
160 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ"
180  FOR I=1 TO N:INPUT X(I):NEXT I
200 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ":INPUT L
250 PRINT "            ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
260 REM ЗАГОЛОВОК ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО ВЫВОДА
300 FOR I=1 TO N:Y(I)=X(I):NEXT I
320 GOSUB 2000:GOSUB 3000:IF G0<.000001 THEN GOTO 1200
340 FOR I=1 TO N:D(I)=-G(I)/G0:NEXT I
360 REM ЗАДАТЬ НАПРАВЛЕНИЕ НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА ИЗ ТОЧКИ Y(I)
370 REM [РАВНОЙ В НАЧАЛЕ X(I)]
380 L(1)=0:FF(1)=Z:ZZ=Z
400 L(3)=L
410 FOR I=1 TO N:X(I)=Y(I)+L(3)*D(I):NEXT I
430 GOSUB 2000:FF(3)=Z
440 GOSUB 3000
450 G2=0
460 FOR I=1 TO N:G2=G2+G(I)*D(I):NEXT I
470 IF FF(3)>=FF(1) OR G2>=0 THEN GOTO 500
480 L=2*L:GOTO 400
500 REM В СТРОКЕ 480 УДВОИТЬ ДЛИНУ ШАГА,
510 REM ЧТОБЫ "НАКРЫТЬ" МИНИМУМ
520 L(2)=L/2
540 FOR I=1 TO N:X(I)=Y(I)+L(2)*D(I):NEXT I
560 GOSUB 2000:FF(2)=Z
580 REM ВЫПОЛНИТЬ ПЕРВУЮ КВАДРАТИЧНУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ
```

```
600 L(4)=L*(FF(2)-.75*FF(1)-.25*FF(3))/(2*FF(2)-FF(1)-FF(3))
620 IF L(4)<0 THEN PRINT "ВНИМАНИЕ"
640 FOR I=1 TO N:X(I)=Y(I)+L(4)*D(I):NEXT I
660 GOSUB 2000:FF(4)=Z
680 REM ИМЕЕМ 4 ЗНАЧЕНИЯ LAMBDA И 4 ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ,
690 REM УПОРЯДОЧИТЬ ИХ В ПОРЯДКЕ УБЫВАНИЯ
700 FOR J=1 TO 3
710 FOR K=J+1 TO 4
720 IF FF(J)<=FF(K) THEN GOTO 760
730 LL=L(J):L(J)=L(K):L(K)=LL
740 F0=FF(J):FF(J)=FF(K):FF(K)=F0
750 REM ПОМЕНЯТЬ МЕСТАМИ FF(J) И FF(K), ЕСЛИ ОНИ НЕ УПОРЯДОЧЕНЫ
760 NEXT K:NEXT J
790 REM ЗАКОНЧИТЬ ПОИСК В ДАННОМ НАПРАВЛЕНИИ,
795 REM ЕСЛИ ТОЧНОСТЬ ДОСТИГНУТА В СТРОКЕ 800
800 IF ABS(L(1)-L(2))<.00005 THEN GOTO 1000
810 REM ЗАПОМНИТЬ ТРИ ЛУЧШИХ ТОЧКИ
820 S1=SGN(L(2)-L(1)):S2=SGN(L(3)-L(1))
830 S3=SGN(L(4)-L(1))
840 IF S1=S2 AND S1=-S3 THEN L(3)=L(4):FF(3)=FF(4)
850 REM ВТОРАЯ И ПОСЛЕДНЯЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
860 DN=(L(2)-L(3))*FF(1)+(L(3)-L(1))*FF(2)+(L(1)-L(2))*FF(3)
870 F=(FF(1)-FF(2))/(2*DN)
880 F=F*(L(2)-L(3))*(L(3)-L(1))
890 L(4)=(L(1)+L(2))/2+F
900 FOR I=1 TO N:X(I)=Y(I)+L(4)*D(I):NEXT I
910 GOSUB 2000:FF(4)=Z
920 REM ПОВТОРИТЬ ВТОРУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ
930 GOTO 700
1000 FOR I=1 TO N:X(I)=Y(I)+L(1)*D(I)
1002 Y(I)=X(I):PRINT "X";I;"=";X(I)
1005 NEXT I
1010 PRINT ""
1020 GOSUB 2000:GOSUB 3000
1040 PRINT "F="Z:PRINT ""
1080 L=L/2
1100 IF G0>.00001 THEN GOTO 340
1150 REM ПЕРЕХОД НА НАЧАЛО СЛЕДУЮЩЕЙ ИТЕРАЦИИ ПОИСКА ИЗ ТЕКУЩЕЙ ТОЧКИ
1200 PRINT "":PRINT
1220 FOR I=1 TO N:PRINT "X";I;"=";X(I):NEXT I
1240 PRINT "МИНИМУМ ФУНКЦИИ F(X1,X2,...,XN)="Z
1300 END
2000 Z=(X(1)-1)^2+(X(2)-3)^2+4*(X(3)+5)^2
2090 FE=FE+1
2100 RETURN
3000 G0=0
3100 G(1)=2*(X(1)-1)
3200 G(2)=2*(X(2)-3)
3300 G(3)=8*(X(3)+5)
3800 FOR I=1 TO N:G0=G0+G(I)*G(I):NEXT I
3810 G0=SQR(G0)
4000 RETURN
```

Выше приведена программа, реализующая метод наискорейшего спуска. В ней использованы те же обозначения, что и на блок-схеме, только записанные прописными буквами, а множитель Лагранжа λ обозначен через L. Вектор в строке 340 является единичным.

Для поиска минимума функции

$$\varphi(\lambda) = f(\mathbf{x}_i + \lambda \mathbf{d}_i) \tag{4.11}$$

в направлении $\mathbf{d}_i$ из точки $\mathbf{x}_i$ используется метод квадратичной интерполяции.

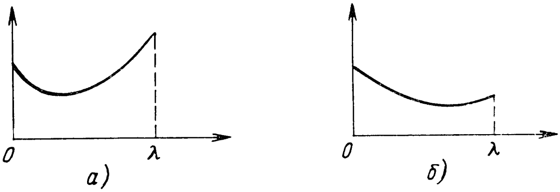

Рис. 4.3

В точке $\mathbf{x}_i$ $\lambda = 0$, и мы выбираем длину шага λ такой, чтобы шаг "перекрыл" минимум функции $\varphi(\lambda)$. Производная

$$\frac{d\varphi}{d\lambda} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_i + \lambda \mathbf{d}_i)^T \mathbf{d}_i. \tag{4.12}$$

В строке 460 программы вычисляется выражение (2.16), которое обозначается G2. В строке 470 проверяется условие "перекрытия" минимума, которое выполняется, если либо $\varphi(\lambda) \geqslant \varphi(0)$, либо $d\varphi(\lambda)/d\lambda\,(= G2) \geqslant 0$.

Замечание. $d\varphi(0)/d\lambda = -\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{g}(\mathbf{x}_i) < 0$ (рис. 4.3, *а*) и *б*)).

Если минимум не попал в отрезок $(0, \lambda)$, то λ удваивается, и это повторяется столько раз, сколько необходимо для выполнения условия "перекрытия".

Удостоверившись, что отрезок $(0, \lambda)$ содержит минимум, в качестве третьей точки возьмем точку $\lambda/2$. Минимальную точку сглаживающего квадратичного полинома находим в соответствии с соотношением (2.12) (см. упр. 8 разд. 2.8) при $t = \lambda/2$, что отражено в строке 600 программы.

Теперь квадратичная интерполяция повторяет программу, приведенную в разд. 2.4, за исключением того, что номера строк увеличены на 300. Точность, заданная в строке 800, конечно, может быть изменена.

В строке 1000 производится присваивание $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i$, и если $|\mathbf{g}(\mathbf{x}_{i+1})|$ достаточно мало, то процесс заканчивается (эта проверка производится в строке 1100 программы). Длину шага уменьшают в строке 1080. В процессе поиска предполагается сходимость к экстремуму, поэтому для эффективности процедуры разумно уменьшить длину шага. При этом деление шага именно на 2 выбрано произвольно.

Пример 1

Используя приведенную выше программу, найти минимум функции

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 3)^2 + 4(x_3 + 5)^2.$$

Для решения данной задачи подходит приведенная выше программа. Минимум, очевидно, равен нулю при $x_1 = 1$, $x_2 = 3$, $x_3 = -5$. Из начальной точки (4; –1; 2) и с начальным шагом длиной 4 с помощью данной программы можно найти минимум за 11 итераций. Ниже приведена распечатка результата работы программы.

```
МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА
ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 2000
ЧАСТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ G(1),G(2),...,G(N) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 3000
ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ПРОИЗВОДИТСЯ МЕТОДОМ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 3
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ
 4
-1
 2
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ
 4
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1 = 3.232205
X 2 = .0237267
X 3 =-5.166087

F= 13.95128

X 1 = 1.189384
X 2 = 2.747488
X 3 =-4.558105

F= .880715

X 1 = 1.140915
X 2 = 2.812114
X 3 =-5.010485

F= .0555979

X 1 = 1.011955
X 2 = 2.98406
X 3 =-4.972104

F= 3.50976E-03

X 1 = 1.008896
X 2 = 2.988139
X 3 =-5.000662

F= 2.215617E-04

X 1 = 1.000754
X 2 = 2.998995
X 3 =-4.99824

F= 1.396853E-05

X 1 = 1.000561
X 2 = 2.999252
X 3 =-5.000042

F= 8.804964E-07

X 1 = 1.000047
X 2 = 2.999937
X 3 =-4.99989

F= 5.51017E-08

X 1 = 1.000035
X 2 = 2.999954
X 3 =-5.000003

F= 3.422542E-09
```

```
X 1 = 1.000004
X 2 = 2.999995
X 3 =-4.999993

F= 2.683578E-10

X 1 = 1.000003
X 2 = 2.999997
X 3 =-5

F= 1.966782E-11


X 1 = 1.000003
X 2 = 2.999997
X 3 =-5
МИНИМУМ ФУНКЦИИ F(X1,X2,...,XN)= 1.966782E-11
```

Критерий завершения каждой итерации приведен в строке 800. Как показывает опыт, не обязательно проводить одномерный поиск тщательно. Необходимо добиться лишь уменьшения значения функции по сравнению со значением $f(\mathbf{x}_i)$. Поэтому, вероятно, лучше заменить оператор в строке 800 на оператор

```
8ØØ IF FF(1) <ZZ THEN GOTO 1ØØØ
```

На первый взгляд это может показаться довольно грубым приемом. Однако объем вычислений при точном поиске минимума может оказаться весьма значительным. Практический опыт решения подобного рода задач показывает, что это неоправданно. То, что теряется на этом этапе в "погоне за точностью", компенсируется "продвижением к минимуму по изменяющимся обходным направлениям". Это продемонстрировано в решении следующего примера 2.

Пример 2

Найти минимум функции

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - 1)^4 + (x_2 - 3)^2 + 4(x_3 + 5)^4.$$

Очевидно, что минимум функции равен нулю в точке (1; 3; −5). Распечатка результата работы программы приведена ниже. Для поиска решения потребовалось девять итераций.

```
МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА
ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 2000
ЧАСТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ G(1),G(2),...,G(N) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 3000
ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ПРОИЗВОДИТСЯ МЕТОДОМ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 3
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ
 4
 2
-1
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ
 4
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1 =-.1757255
X 2 = 2.077328
X 3 =-2.237252

F= 33.29327
```

```
X 1 = .6431065
X 2 = 2.30976
X 3 =-5.021118

F= .4944399

X 1 = .7308417
X 2 = 2.975843
X 3 =-4.939602

F= 2.042376E-02

X 1 = .7408926
X 2 = 2.982069
X 3 =-5.001866

F= 4.842788E-03

X 1 = .8003951
X 2 = 3.012736
X 3 =-4.989102

F= 2.224726E-03

X 1 = .8051051
X 2 = 3.008965
X 3 =-5.002012

F= 1.539329E-03
```

Теперь все внимание должно быть сосредоточено на программах. Казалось бы, достаточно заменить подпрограммы вычисления функции и аргумента. Если бы все было так просто! На сегодняшний день не существует "универсального оптимизатора", который всегда гарантирует удачный результат. Приведенные программы вполне ясны, однако при их использовании требуется осторожность. Их работа может неожиданно завершиться неудачей из-за слабого изменения критерия завершения (например, от значений $< 0{,}00001$ до значений $< 0{,}0001$). Если требуется точность бóльшая, чем может обеспечить ЭВМ, то программа может "зациклиться". Это справедливо для всех программ, поэтому будьте готовы в отдельных случаях проявить настойчивость.

Следует сказать, что метод наискорейшего спуска *не рекомендуется* в качестве "серьезной" оптимизационной процедуры. На первый взгляд он привлекателен, но для практического применения "работает" слишком медленно. Дело в том, что свойство наискорейшего спуска является лишь *локальным* свойством, и поэтому необходимо частое изменение направления, что и приводит в итоге к неэффективной вычислительной процедуре. Метод оказывается непригодным для использования вторых производных целевой функции.

Наилучший способ применения вторых производных состоит в разработке метода, основанного на свойствах квадратичных функций, которые являются одними из простейших. Если использовать разложение в ряд Тейлора (1.4), то можно заметить, что в окрестности минимума любая функция может быть аппроксимирована квадратичной функцией, если ее вторые производные не равны нулю. Поэтому методы поиска для квадратичных функций могут успешно применяться и для других функций.

В следующем разделе будут получены некоторые важные свойства квадратичной функции n переменных.

4.2. КВАДРАТИЧНЫЕ ФУНКЦИИ

Квадратичная функция

$$F(\mathbf{x}) = a + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} + \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{x}, \qquad (4.13)$$

где a – константа; $\mathbf{b}$ – постоянный вектор и $\mathbf{G}$ – положительно определенная симметрическая матрица – имеет минимум в точке $\mathbf{x}^*$, причем $\mathbf{x}^*$ определяется следующим образом:

$$\nabla F(\mathbf{x}^*) = \mathbf{b} + \mathbf{G}\mathbf{x}^* = 0, \qquad (4.14)$$

откуда $\mathbf{x}^* = -\mathbf{G}^{-1}\mathbf{b}$. Из уравнения (1.4) следует, что при выполнении условий непрерывности любую функцию можно аппроксимировать в окрестности точки $\mathbf{x}_0$ функцией

$$\varphi(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\mathrm{T}}\nabla f(\mathbf{x}_0) + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\mathrm{T}}\mathbf{G}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \qquad (4.15)$$

где $\mathbf{G}(\mathbf{x}_0)$ – матрица Гессе, вычисленная в точке $\mathbf{x}_0$.

Разумной аппроксимацией минимума функции $f(\mathbf{x})$ может быть минимум функции $\varphi(\mathbf{x})$. Если последний находится в точке $\mathbf{x}_m$, то

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) + \mathbf{G}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0},$$

откуда

$$\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_0 - \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_0)\,\nabla f(\mathbf{x}_0),$$

или

$$\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_0 - \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_0)\,\mathbf{g}(\mathbf{x}_0). \qquad (4.16)$$

Таким образом следует модифицировать итерационное уравнение (4.9), и точкой $\mathbf{x}_i$ следующей аппроксимации минимума будет

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_i)\,\mathbf{g}(\mathbf{x}_i) \qquad (4.17)$$

или, в более удобном виде,

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \lambda_i\,\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_i)\,\mathbf{g}(\mathbf{x}_i), \qquad (4.18)$$

где длина шага λ_i определяется одномерным поиском в направлении $\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_i)\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$.

Метод Ньютона – Рафсона основан на последнем уравнении. Не будем рассматривать его во всех подробностях, упомянем лишь некоторые его особенности. Уравнения (4.17) и (4.18) в том виде, как они записаны, требуют вычисления и обращения матрицы Гессе на каждом шаге, что часто является основной частью вычислений. Если точка $\mathbf{x}_i$ близко расположена к точке $\mathbf{x}^*$, то сходимость будет быстрой, поскольку в общем случае функция $\varphi(\mathbf{x})$ будет хорошо аппроксимировать функцию $f(\mathbf{x})$ в этой окрестности. Как норму градиента $|\mathbf{g}(\mathbf{x}_{i+1})|$, так и расстояние между точками $|\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i|$ следует проверить на выполнение критерия завершения. Интересно отметить, что по сравнению с простым методом наискорейшего спуска направлением спуска в данном случае будет не $-\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$, а $-\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_i)\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$, где учитываются и вторые производные. Методом Давидона – Флетчера – Пауэлла можно получить наилучший результат, производя поиск на i-м этапе в направлении $-\mathbf{H}_i\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$, где $\mathbf{H}_i$ – положительно определенная симметрическая матрица, которая в конечном счете становится равной $-\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}^*)$[1]. Таким образом, этот метод обходит как вычисление, так и обращение матрицы $\mathbf{G}(\mathbf{x}_i)$ при каждой итерации.

Следовательно, направление поиска при каждой итерации является решающим фактором, если говорить об эффективности итерационных методов поиска. При каждой итерации желательно произвести одномерный поиск в наилучшем направлении. Для квадратичной функции n переменных вида (4.13) наилучшим направлением является направление, *сопряженное* с предыдущим направлением поиска. Сначала дадим ему определение, а затем поясним, чем оно полезно.

Говорят, что два направления $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ сопряжены относительно симметрической положительно определенной матрицы $\mathbf{G}$, если

$$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{q} = 0. \tag{4.19}$$

Можно показать, что если $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ есть n взаимно сопряженных направлений в n-мерном пространстве, то они линейно независимы. Если это не так, то существуют постоянные $\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_{n-1}$, не все равные нулю и такие, что

$$\alpha_0\mathbf{p}_0 + \alpha_1\mathbf{p}_1 + \ldots + \alpha_{n-1}\mathbf{p}_{n-1} = 0.$$

Тогда для любого k_{n-1} $(0 \leqslant k \leqslant n-1)$ справедливо равенство

$$\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\sum_{j=0}^{n-1}\alpha_j\mathbf{p}_j = 0,$$

откуда $\alpha_k\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{p}_k = 0$, так как из-за сопряженности все другие члены исчезают $(\mathbf{p}_k^{\mathrm{T}}\ \mathbf{G}\mathbf{p}_g = 0, k \neq j)$.

Поскольку $\mathbf{p}_k \neq 0$ и матрица $\mathbf{G}$ положительно определена, $\alpha_k = 0$. Отсюда следует, что векторы $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ линейно независимы.

Перед дальнейшими вычислениями удобно переписать функцию (4.13) в виде

$$F(\mathbf{x}) = a + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} + \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{x},$$

причем ее минимум находится в точке

$$\mathbf{x}^* = -\mathbf{G}^{-1}\mathbf{b}$$

---

[1] Этот предельный переход возможен при выполнении определенных условий (см. работу [Д1]). – *Прим. ред.*

и

$$F(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}^*) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \nabla F(\mathbf{x}^*) + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) =$$

$$= F(\mathbf{x}^*) + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)(\text{так как } \nabla F(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}) =$$

$$= a + \mathbf{x}^{*\mathrm{T}} \mathbf{b} + \tfrac{1}{2}\mathbf{x}^{*\mathrm{T}} \mathbf{G}\mathbf{x}^* + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) =$$

$$= a - \tfrac{1}{2}\mathbf{b}^{\mathrm{T}} \mathbf{G}^{-1} \mathbf{b} + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$$

$$\text{или} \quad F(\mathbf{x}) = c + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathrm{T}} = \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*), \tag{4.20}$$

где $c = a - \frac{1}{2}\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{b}$ – константа.

Предположим, что для поиска минимума функции (4.20) используется итерационная процедура.

Ясно, что не следует сразу принимать решение о направлениях поиска (как, например, при поиске методом покоординатного спуска), а лучше накапливать информацию, полученную на предыдущих этапах поиска, для того чтобы определять дальнейшие направления поиска.

Начнем из точки $\mathbf{x}_0$ и проведем поиск в направлении $\mathbf{p}_0$ с целью нахождения минимума в точке

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \lambda_0 \mathbf{p}_0, \tag{4.21}$$

где λ_0 – некоторая скалярная величина.

Отметим, что в точке $\mathbf{x}_1$ направление $\mathbf{g}(\mathbf{x}_1) = \nabla F(\mathbf{x}_1)$ ортогонально направлению $\mathbf{p}_0$ и

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_0 = 0 \tag{4.22}$$

(см. уравнения (2.16) и (4.12)).

В общем случае на шаге i производится поиск из точки $\mathbf{x}_i$ в направлении $\mathbf{p}_i$ с целью нахождения минимума в точке

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \lambda_i \mathbf{p}_i, \tag{4.23}$$

где для $F(\mathbf{x})$ справедливы соотношения

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_{i+1})^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_i = 0; \tag{4.24}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{G}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}^*). \tag{4.25}$$

Повторным применением уравнения (4.23) после n шагов получим

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_n &= \mathbf{x}_{n-1} + \lambda_{n-1} \mathbf{p}_{n-1} = \\ &= \mathbf{x}_{n-2} + \lambda_{n-2} \mathbf{p}_{n-2} + \lambda_{n-1} \mathbf{p}_{n-1} = \\ &= \mathbf{x}_{j+1} + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \mathbf{p}_i \end{aligned} \tag{4.26}$$

для всех j в интервале $0 \leqslant j < n - 1$.

Таким образом, согласно уравнению (4.25)

$$G(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*) = \mathbf{G}(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}^*) + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \mathbf{G}\mathbf{p}_i. \tag{4.27}$$

Следовательно,

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_n)^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_j = \mathbf{g}(\mathbf{x}_{j+1})^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_j + \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \mathbf{p}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{G}\mathbf{p}_j \tag{4.28}$$

и из уравнения (4.28) получаем:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_n)^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_j = \sum_{i=j+1}^{n-1} \lambda_i \mathbf{p}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{G}\mathbf{p}_j. \tag{4.29}$$

Теперь, если все векторы $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ взаимно сопряжены так, что

$$\mathbf{p}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{G}\mathbf{p}_j = 0 \quad \text{при } i \neq j, \tag{4.30}$$

то из соотношения (4.24) следует

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_n)^{\mathrm{T}} \mathbf{p}_j = 0 \quad \text{при } j = 0, 1, \ldots, n-1. \tag{4.31}$$

Но поскольку в этом случае векторы $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_{n-1}$ линейно независимы и, таким образом, образуют базис, то

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_n) = 0, \tag{4.32}$$

откуда

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*) = 0 \tag{4.33}$$

и

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{x}^*.$$

Следовательно, если поиск производится по взаимно сопряженным направлениям, то минимум квадратичной функции n переменных будет найден не более чем за n шагов. Метод Флетчера – Ривса, изложенный в разд. 4.4, основан на этой идее.

4.3. МЕТОД ДАВИДОНА – ФЛЕТЧЕРА – ПАУЭЛЛА

Метод Давидона – Флетчера – Пауэлла (ДФП) основан на использовании соотношений (4.16) и (4.18), но в нем не требуется на каждом шаге вычислять обратный гессиан $\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{x}_i)$, так как направление поиска на шаге i является направлением $-\mathbf{H}_i\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$, где $\mathbf{H}_i$ – положительно определенная симметрическая матрица, которая *обновляется* на каждом шаге, как это будет описано ниже. В пределе матрица $\mathbf{H}$ становится равной обратному гессиану.

Начнем поиск из начальной точки $\mathbf{x}_0$, взяв в качестве начальной матрицу $\mathbf{H}_0$ (обычно единичную матрицу, хотя в этом случае может подойти любая симметрическая положительно определенная матрица). Итерационная процедура может быть представлена следующим образом (вместо $\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)$ удобнее писать $\mathbf{g}_i$):

1. На шаге i имеются точка $\mathbf{x}_i$ и положительно определенная симметрическая матрица $\mathbf{H}_i$.

2. В качестве направления поиска взять направление

$$\mathbf{d}_i = -\mathbf{H}_i\mathbf{g}_i. \tag{4.34}$$

3. Чтобы найти функцию λ_i, минимизирующую функцию $f(\mathbf{x}_i + \lambda_i\mathbf{d}_i)$, произвести одномерный поиск вдоль прямой $\mathbf{x}_i + \lambda\mathbf{d}_i$.

4. Положить

$$\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{d}_i. \tag{4.35}$$

5. Положить

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \mathbf{v}_i. \tag{4.36}$$

6. Найти $f(\mathbf{x}_{i+1})$ и $\mathbf{g}_{i+1}$. Завершить процедуру, если величины $|\mathbf{g}_{i+1}|$ или $|\mathbf{v}_i|$ достаточно малы. В противном случае продолжить.

Замечание. Из соотношения (4.24) следует, что

$$\mathbf{g}^{\mathrm{T}}_{i+1}\mathbf{v}_i = 0. \tag{4.37}$$

7. Положить

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i. \tag{4.38}$$

8. Обновить матрицу $\mathbf{H}$ следующим образом:

$$\mathbf{H}_{i+1} = \mathbf{H}_i + \mathbf{A}_i + \mathbf{B}_i, \tag{4.39}$$

где

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{v}_i\mathbf{v}^{\mathrm{T}}_i / (\mathbf{v}^{\mathrm{T}}_i\mathbf{u}_i); \tag{4.40}$$

$$\mathbf{B}_i = -\mathbf{H}_i\mathbf{u}_i\mathbf{u}^{\mathrm{T}}_i\mathbf{H}_i / (\mathbf{u}^{\mathrm{T}}_i\mathbf{H}_i\mathbf{u}_i). \tag{4.41}$$

9. Увеличить i на единицу и вернуться на шаг 2.

Поясним процедуру, следуя аргументации Флетчера и Пауэлла.

а) Процесс будет устойчив, если функция $\mathbf{v}_i$ убывает и величина λ_i положительна. Поскольку $\mathbf{g}_i$ есть направление наискорейшего возрастания, функция $\mathbf{v}_i$ будет убывать тогда, когда произведение

$$\begin{aligned} -\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\,\mathbf{g}_i = -\mathbf{g}_i^{\mathrm{T}}\,\mathbf{v}_i &= \\ = \lambda_i\,\mathbf{g}_i^{\mathrm{T}}\,\mathbf{H}_i\,\mathbf{g}_i& \end{aligned} \tag{4.42}$$

положительно.

Это справедливо, если $\mathbf{H}_i$ – симметрическая положительно определенная матрица для любого i. Начальная матрица $\mathbf{H}_0$ обладает этими свойствами по определению. Процесс обновления в соответствии с соотношениями (4.39) – (4.41) сохраняет симметричность гессиана. Методом индукции докажем, что после обновления матрица $\mathbf{H}_i$ остается положительно определенной. Если это условие справедливо, то

$$\mathbf{C}^{\mathrm{T}}_i\mathbf{C}_i = \mathbf{C}_i\mathbf{C}^{\mathrm{T}}_i = \mathrm{H}_i. \tag{4.43}$$

Положим

$$\mathbf{p} = \mathbf{C}_i\eta \quad \text{и} \quad \mathbf{q} = \mathbf{C}_i\mathbf{u}_i, \tag{4.44}$$

где η – произвольный вектор.

Тогда

$$\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_{i+1} \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \boldsymbol{\eta} + \frac{\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i} - \frac{\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \boldsymbol{\eta}}{\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i} =$$

$$= p^2 - \frac{(\mathbf{p}^{\mathrm{T}} \mathbf{q})^2}{q^2} + \frac{(\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_i)^2}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i} =$$

$$= \frac{p^2 q^2 - (\mathbf{p}^{\mathrm{T}} \mathbf{q})^2}{q^2} + \frac{(\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_i)^2}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i} \geqslant$$

$$\geqslant \frac{(\boldsymbol{\eta}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_i)^2}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i}, \qquad (4.45)$$

поскольку $\mathbf{p}^2 \mathbf{q}^2 \geqslant (\mathbf{p}^{\mathrm{T}} \mathbf{q})^2$ согласно неравенству Шварца.

Знаменатель в соотношении (4.45) положителен, так как

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i = \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} [\mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i] = -\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_i,$$

поскольку $\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{g}_{i+1} = 0$ из уравнения (4.37).

Следовательно,

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{g}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \mathbf{g}_i > 0, \qquad (4.46)$$

так как $\lambda_i > 0$ и матрица $\mathbf{H}_i$ положительно определена.

Таким образом, $\eta^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_{i+1} \eta > 0$, что и доказывает положительную определенность матрицы $\mathbf{H}_{i+1}$.

б) Теперь покажем, что если метод ДФП применяется к квадратичной функции (см. (4.13)) с симметрической положительно определенной матрицей $\mathbf{G}$, то $\mathbf{H}_n = \mathbf{G}^{-1}$ и поиск минимума закончится через n шагов. Для доказательства достаточно показать, что $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_k$ – линейно независимые собственные векторы матрицы $\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}$ с собственными значениями, равными единице. Тогда матрица $\mathbf{H}_n \mathbf{G}$ должна быть единичной.

Отметим, что из соотношения (4.38) следует, что

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i &= \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i = \\ &= \mathbf{G}\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{G}\mathbf{x}_i = \\ &= \mathbf{G}\mathbf{v}_i. \end{aligned} \qquad (4.47)$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{i+1} \mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{H}_{i+1} \mathbf{u}_i &= \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i + \mathbf{A}_i \mathbf{u}_i + \mathbf{B}_i \mathbf{u}_i = \\ &= \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i + \mathbf{v}_i - \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i, \end{aligned}$$

что следует из соотношений (4.39) – (4.41) и из того, что $\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i$ и $\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i$ можно сократить.

Таким образом,

$$\mathbf{H}_{i+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i. \tag{4.48}$$

Далее методом индукции по k покажем, что для $k = 2, 3, \ldots, n$ справедливы соотношения

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_j = 0 \quad \text{при } 0 \leqslant i < j < k, \tag{4.49}$$

$$\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i \quad \text{при } 0 \leqslant i < k. \tag{4.50}$$

Для доказательства в соотношении (4.48) положим $i = 0$ и получим $\mathbf{H}_1\mathbf{G}\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0$, т. е. соотношение (4.50) при $k = 1$. При $k = 2$ соотношение (4.50) будет иметь вид

$$\mathbf{H}_2\mathbf{G}\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_c \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_2\mathbf{G}\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1.$$

Второе равенство следует из соотношения (4.48) при $i = 1$.

Для первого равенства имеем

$$\mathbf{H}_2\mathbf{G}\mathbf{v}_0 = \mathbf{H}_1\mathbf{G}\mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_1\frac{\mathbf{v}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_0}{\mathbf{v}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_1} - \frac{\mathbf{H}_1\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_1\mathbf{G}\mathbf{v}_0}{\mathbf{u}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_1\mathbf{u}_1}.$$

Два последних члена в правой части равны нулю, поскольку

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_0 &= \mathbf{v}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_o^{\mathrm{T}}\mathbf{G}(-\lambda_1\mathbf{H}_1\mathbf{g}_1) = \\ &= -\lambda_1\mathbf{g}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_1\mathbf{G}\mathbf{v}_0 = \\ &= -\lambda_1\mathbf{g}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_0 = \\ &= 0,\end{aligned}$$

что следует из соотношения (4.48) при $i = 0$ и из соотношения (4.37) при $i = 0$. Кроме того, $\mathbf{u}_1 = \mathbf{G}\mathbf{v}_1$, так что $\mathbf{u}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_1\mathbf{G}\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_0$. Таким образом, показано, что соотношение (4.50) справедливо при $k = 2$. После переноса в другую часть уравнения получим требуемый результат:

$$\mathbf{v}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_1 = 0,$$

что является соотношением (4.39) при $k = 2$.

Теперь по индукции покажем, что если соотношения (4.49) и (4.50) справедливы при k, то они справедливы и при $k + 1$.

Имеем

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_k &= \mathbf{b} + \mathbf{G}\mathbf{x}_k = \\ &= \mathbf{b} + \mathbf{G}(\mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{v}_{k-1}) = \\ &= \mathbf{b} + \mathbf{G}(\mathbf{x}_{k-2} + \mathbf{v}_{k-2} + \mathbf{v}_{k-1}) = \\ &= \mathbf{g}_{i+1} + \mathbf{G}(\mathbf{v}_{i+1} + \mathbf{v}_{i+2} + \cdots + \mathbf{v}_{k-1}).\end{aligned} \tag{4.51}$$

Из соотношения (4.49) при $i < k - 1$ получим

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\ \mathbf{g}_k = \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} g_{i+1} = 0,$$

и из соотношения (4.37) непосредственно следует, что

$\mathbf{v}_{k-1}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k = 0.$

Тогда

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_k = 0 \text{ при } 0 \leqslant i < k, \tag{4.52}$$

и из соотношения (4.50) следует, что

$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{H}_k\mathbf{g}_k = 0$ при $0 \leqslant i < k$,

причем

$-\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{d}_k = 0$

и

$-\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_k = 0$, поскольку $\mathbf{v}_k = \lambda_k\mathbf{d}_k$.

Следовательно,

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_k = 0 \quad \text{при } 0 \leqslant i < k, \tag{4.53}$$

т. е.

$$\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_j = 0 \quad \text{при } 0 \leqslant i < j < k + 1. \tag{4.54}$$

Из соотношений (4.47) и (4.50) также имеем

$$\begin{aligned}(\mathbf{u}_k)^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i &= \mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_i = \\ &= \mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = 0 \text{ при } 0 \leqslant i < k\ (<k+1).\end{aligned} \tag{4.55}$$

Тогда из соотношений (4.39) – (4.50) следует

$$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i + \frac{\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{u}_k\mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i}{\mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{u}_k} = \mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i,$$

так как

$\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = 0$

и

$\mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = 0$ при $0 \leqslant i < k$.

Таким образом, показано, что

$$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i \quad \text{при } 0 \leqslant i < k. \tag{4.56}$$

При $i = k$ имеем

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_k &= \mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_k + \frac{\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_k}{\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_k} - \frac{\mathbf{H}_k\mathbf{u}_k\mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_k}{\mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{u}_k} = \\ &= \mathbf{H}_k\mathbf{u}_k + \mathbf{v}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{u}_k,\end{aligned}$$

поскольку

$\mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_k = \mathbf{v}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_k \quad$ и $\quad \mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{G}\mathbf{v}_k = \mathbf{u}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_k\mathbf{u}_k.$

Следовательно, $\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_k = \mathbf{v}_k$ и из соотношения (4.56) получаем

$$\mathbf{H}_{k+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i \quad \text{при } 0 \leqslant i < k+1. \tag{4.57}$$

Соотношения (4.54) и (4.57) так же справедливы для следующего k, как и соотношения (4.49) и (4.50). Следовательно, доказательство по индукции закончено.

Из соотношения (4.49) следует, что векторы $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1 \ldots, \mathbf{v}_{n-1}$ линейно независимы. Они являются взаимно сопряженными по отношению к матрице $\mathbf{G}$. Из соотношения (4.50) следует, что $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_{n-1}$ являются собственными векторами матрицы $\mathbf{H}_n\mathbf{G}$ с собственным значением, равным единице. Тогда матрица $\mathbf{H}_n\mathbf{G}$ должна быть единичной. Следовательно,

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{G}^{-1}. \tag{4.58}$$

Из соотношения (4.52) следует, что минимум найден за n итераций. Вектор $\mathbf{g}_n$ должен быть ортогонален каждому из n независимых векторов $\mathbf{v}_0$, $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_{n-1}$. Следовательно,

$$\mathbf{g}_n = 0. \tag{4.59}$$

в) Способ обновления матрицы $\mathbf{H}$ описывается в соотношении (4.39):

$$\mathbf{H}_n = \mathbf{H}_0 + \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}_i + \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{B}_i.$$

Покажем, что $\mathbf{G}^{-1} = \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}_i$. Из условий ортогональности (4.49) следует

$$\mathbf{V}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{V} = \mathrm{D},$$

где $\mathbf{V}$ – матрица, состоящая из векторов $\mathbf{v}_i$, а D – диагональная матрица с элементами $\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i$.

Следовательно,

$$\mathbf{G} = (\mathbf{V}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{D}\mathbf{V}^{-1}.$$

Тогда

$$\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{V}\mathrm{D}^{-1}\mathbf{V}^{\mathrm{T}},$$

а поскольку D – диагональная матрица, то можно произвести инверсию и перемножить матрицы для получения выражения

$$\mathbf{G}^{-1} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{v}_i} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\mathbf{v}_i\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_i}$$

(см. соотношение (4.47)).

Таким образом,

$$\mathbf{G}^{-1} = \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}_i. \tag{4.60}$$

Поскольку соотношение (4.48) должно выполняться, то $\mathbf{H}_{i+1}\mathbf{G}\mathbf{v}_i = \mathbf{V}_i$, а это означает, что $\mathbf{v}_i = \mathbf{H}_i\mathbf{G}\mathbf{v}_i + \mathbf{A}_i\mathbf{G}\mathbf{v}_i + \mathbf{B}_i\mathbf{G}\mathbf{v}_i$. Так как

$$\mathbf{A}_i \mathbf{G} \mathbf{v}_i = \mathbf{A}_i \mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i}{\mathbf{v}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i} = \mathbf{v}_i ,$$

то

$$\mathbf{B}_i \mathbf{G} \mathbf{v}_i = -\mathbf{H}_i \mathbf{G} \mathbf{v}_i = -\mathbf{H}_i \mathbf{u}_i. \tag{4.61}$$

Отсюда просто найти $\mathbf{B}_i$ (хотя и неоднозначно) :

$$\mathbf{B}_i = \frac{-\mathbf{H}_i \mathbf{u}_i \mathbf{z}^{\mathrm{T}}}{\mathbf{z}^{\mathrm{T}} \mathbf{G} \mathbf{v}_i} = \frac{-\mathbf{H}_i \mathbf{u}_i \mathbf{z}^{\mathrm{T}}}{\mathbf{z}^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_i} ,$$

где $\mathbf{z}$ – произвольный вектор. Поскольку мы хотим, чтобы матрица $\mathbf{B}_i$ была симметрической, то выберем в качестве вектора $\mathbf{z} = \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i$, такой, чтобы

$$\mathbf{B}_i = \frac{-\mathbf{H}_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i}{\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{H}_i \mathbf{u}_i} . \tag{4.62}$$

Этим завершается теоретическое изложение метода ДФП, который использует как идеи метода Ньютона – Рафсона, так и свойство сопряженных направлений, и при применении для минимизации квадратичной функции n переменных он сходится не более чем за n итераций. Это весьма мощная оптимизационная процедура, очень эффективная при оптимизации большинства функций независимо от того, квадратичны они или нет.

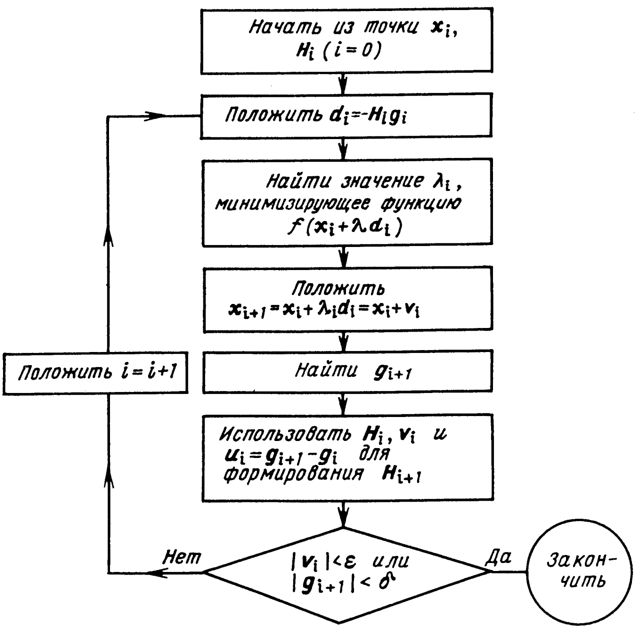

Рис. 4.4

Ниже приведены блок-схема процедуры (рис. 4.4) и текст программы, реализующий данный метод. В дополнении к программе должны быть написаны подпрограммы вычисления рассматриваемой функции и ее производных. Логическое построение метода отражено в программе. Одномерный поиск осуществляется кубической интерполяцией, но поиск заканчивается не при достижении предельной сходимости, а после того, как будет получено улучшение значения функции. Теоретически это означает, что метод утрачивает свойство сходимости для квадратичных функций, но практически является эффективным и быстрым. К тому же дополнительная работа, выполняемая в случае полного завершения одномерного поиска, скорее всего, не будет оправданной.

В тексте программы использованы обозначения, приведенные в алгоритме и имеются комментарии. Для одномерного поиска в строках 600 – 1010 использована процедура кубической интерполяции из разд. 2.6, отличающаяся в данном случае тем, что она завершается прежде, чем достигается сходимость. Таким образом, строка 920 реализует выход из процедуры одномерного поиска, если интерполированное значение функции меньше, чем оба значения функции, используемые в этой процедуре. Последующий интервал поиска, если таковой существует, определяется в строке 930.

Пример 1

Используя точку с координатами (3; –1; 0; 1) в качестве начальной точки, минимизировать функцию Пауэлла

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4.$$

Приведенная ниже подпрограмма справедлива для данной функции. Предложенная начальная точка является одной из неудачных для данной функции. Минимум равен нулю в точке (0; 0; 0; 0).

```
100 PRINT "МИНИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ ДФП"
120 REM ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ПРОИЗВОДИТСЯ КУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИЕЙ
150 REM ФУНКЦИЯ F(X1,X2,...XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000
155 REM ЗНАЧЕНИЯ G(1),G(2),...G(N) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 6000
200 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
220 DIM X(N),P(N),Q(N),R(N),D(N),G(N),U(N),V(N),Y(N),M(N)
240 DIM H(N,N)
300 REM ПЕРВОНАЧАЛЬНО ЗАДАТЬ H ЕДИНИЧНОЙ МАТРИЦЕЙ
320 CC=0:FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO N:H(I,J)=0:NEXT J:H(I,I)=1:NEXT I:TT=0
330 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ"
340 FOR I=1 TO N:PRINT "X";I;:INPUT X(I):NEXT I:PRINT ""
360 REM ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ ВЫВОД
380 PRINT "           ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
400 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):Y(I)=X(I):PRINT "X";I,X(I):NEXT I
410 GOSUB 5000
420 PRINT "ИТЕРАЦИЯ";CC;"   ЗНАЧЕНИЕ  ";Z
430 FP=Z:GOSUB 6000:G1=G0
440 REM ГРАДИЕНТ ЗАПОМНИТЬ В U И ВЫБРАТЬ НАЧАЛЬНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ D
450 FOR I=1 TO N
460 U(I)=G(I):D(I)=0
470 FOR J=1 TO N
480 D(I)=D(I)-H(I,J)*G(J)
490 NEXT J
500 NEXT I
600 GP=0
610 FOR I=1 TO N:GP=GP+G(I)*D(I):NEXT I
620 IF GP < 0 THEN GOTO 680
```

```
625 REM НАЙТИ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ И, ЕСЛИ НЕОБХОДИМО,
627 REM ИЗМЕНИТЬ НАПРАВЛЕНИЕ СПУСКА НА ПРОТИВОПОЛОЖНОЕ
630 QX=ABS(2*FP/GP):IF QX>1 THEN QX=1
640 FOR I=1 TO N
650 X(I)=P(I)-QX*D(I):P(I)=X(I):NEXT I
660 GOSUB 5000:FP=Z:PRINT "НЕСТАБИЛЬНОСТЬ?"
670 GOSUB 6000:G1=G0:GOTO 600
680 QX=ABS(2*FP/GP):IF QX>1 THEN QX=1
690 HH=QX
700 REM НАЙТИ СЛЕДУЮЩУЮ ТОЧКУ Q
710 BB=HH
720 FOR I=1 TO N
730 Q(I)=P(I)+BB*D(I):X(I)=Q(I)
740 NEXT I
750 GOSUB 5000:FQ=Z
760 GOSUB 6000:G2=G0
770 GQ=0
710 BB=HH
720 FOR I=1 TO N
730 Q(I)=P(I)+BB*D(I):X(I)=Q(I)
740 NEXT I
750 GOSUB 5000:FQ=Z
760 GOSUB 6000:G2=G0
770 GQ=0
780 FOR I=1 TO N
790 GQ=GQ+G(I)*D(I)
800 NEXT I
810 IF GQ>0 OR FQ>FP THEN GOTO 830
815 REM ВЫПОЛНИТЬ КУБИЧЕСКУЮ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ
817 REM ИЛИ УДВОИТЬ ШАГ, ЧТОБЫ "НАКРЫТЬ" МИНИМУМ
820 HH=2*HH:GOTO 700
830 ZZ=3*(FP-FQ)/HH:ZZ=ZZ+GP+GQ
840 WW=ZZ*ZZ-GP*GQ:IF WW<0 THEN WW=0
850 W=SQR(WW)
860 DD=HH*(1-(GQ+W-ZZ)/(GQ-GP+2*W))
870 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+DD*D(I):NEXT I
880 GOSUB 5000:FR=Z
890 GOSUB 6000:G3=G0
895 REM НАЙТИ ГРАДИЕНТ В НОВОЙ ТОЧКЕ
900 GR=0
910 FOR I=1 TO N:GR=GR+G(I)*D(I):NEXT I
920 IF Z<=FP AND Z<=FQ THEN GOTO 1100
930 IF GR>0 THEN GOTO 990
960 HH=HH-DD
970 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):NEXT I
980 FP=Z:GP=GR:G1=G0:GOTO 830
990 HH=DD
1000 FOR I=1 TO N:Q(I)=X(I):NEXT I
1050 REM ОБНОВИТЬ МАТРИЦУ H
1100 KK=0:WK=0:DK=0
1110 FOR I=1 TO N
1120 U(I)=G(I)-U(I):V(I)=X(I)-Y(I)
1130 NEXT I
1140 FOR I=1 TO N:M(I)=0
1150 FOR J=1 TO N
1160 M(I)=M(I)+H(I,J)*U(J)
1170  NEXT J
1180 KK=KK+M(I)*U(I):WK=WK+V(I)*U(I)
1190 DK=DK+V(I)*V(I)
1200 NEXT I
1205 IF KK=0 OR WK=0 THEN GOTO 1260
1210 FOR I=1 TO N
1220 FOR J=1 TO N
1230 H(I,J)=H(I,J)-M(I)*M(J)/KK+V(I)*V(J)/WK
1240 NEXT J
1250 NEXT I
```

```
1260 CC=CC+1
1265 REM ПРОВЕРКА КРИТЕРИЯ ЗАВЕРШЕНИЯ
1270 IF SQR(DK)<.00005 OR G3<.00001 THEN GOTO 1300
1275 REM НАЧАТЬ НОВУЮ ИТЕРАЦИЮ ПОИСКА
1280 GOTO 400
1300 PRINT "МИНИМУМ НАЙДЕН"
1310 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ИТЕРАЦИЙ=";CC;"  ЗНАЧЕНИЕ МИН
1320 FOR I=1 TO N
1330 PRINT "X";I,X(I)
1340 NEXT I
1350 END
5000 Z=0
5010 Z=(X(1)+10*X(2))^2+5*(X(3)-X(4))^2
5020 Z=Z+(X(2)-2*X(3))^4+10*(X(1)-X(4))^4
5100 TT=TT+1
5200 RETURN
6000 GO=0
6100 G(1)=2*(X(1)+10*X(2))+40*(X(1)-X(4))^3
6200 G(2)=20*(X(1)+10*X(2))+4*(X(2)-2*X(3))^3
6300 G(3)=10*(X(3)-X(4))-8*(X(2)-2*X(3))^3
6400 G(4)=-10*(X(3)-X(4))-40*(X(1)-X(4))^3
7000 FOR I=1 TO N:GO=GO+G(I)*G(I):NEXT I
7010 GO=SQR(GO)
7500 RETURN
```

```
МИНИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ ДФП
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 4
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ
X 1  3
X 2 -1
X 3  0
X 4  1

          ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              3
X 2             -1
X 3              0
X 4              1
ИТЕРАЦИЯ 0      ЗНАЧЕНИЕ    215
X 1              1.949874
X 2             -.5058231
X 3              6.863568E-03
X 4              2.063853
ИТЕРАЦИЯ 1      ЗНАЧЕНИЕ    30.89246
X 1              1.952094
X 2             -.1460427
X 3              .1139128
X 4              1.983205
ИТЕРАЦИЯ 2      ЗНАЧЕНИЕ    17.73255
X 1              1.672088
X 2             -.1326144
X 3              .6173387
X 4              1.740239
ИТЕРАЦИЯ 3      ЗНАЧЕНИЕ    9.919396
X 1              .1212769
X 2             -9.131193E-03
X 3              .2314347
X 4              .2154706
ИТЕРАЦИЯ 4      ЗНАЧЕНИЕ    5.259228E-02
X 1              .1124414
X 2             -1.592427E-02
X 3              .1754911
X 4              .2051925
```

```
ИТЕРАЦИЯ 5     ЗНАЧЕНИЕ   2.546394E-02
X 1             1.728326E-02
X 2            -1.335926E-04
X 3             .1186576
X 4             .1068345


X 1             1.669752E-03
X 2            -1.673108E-04
X 3             1.655202E-03
X 4             1.653915E-03
ИТЕРАЦИЯ 23     ЗНАЧЕНИЕ   1.658259E-10
X 1             5.41309E-04
X 2            -5.39442E-05
X 3             9.644107E-04
X 4             9.654203E-04
ИТЕРАЦИЯ 24     ЗНАЧЕНИЕ   2.436223E-11
МИНИМИЗАЦИЯ ЗАКОНЧЕНА
КОЛИЧЕСТВО ИТЕРАЦИЙ РАВНО  25   ЗНАЧЕНИЕ МИНИМУМА РАВНО  7.528931E-12
X 1             1.960656E-04
X 2            -1.964616E-05
X 3             7.700225E-04
X 4             7.697501E-04
```

4.4. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА – РИВСА

Метод Флетчера – Ривса основан на том, что для квадратичной функции n переменных n одномерных поисков вдоль взаимно сопряженных направлений позволяют найти минимум.

Рассмотрим функцию, описанную выражением (4.13), т. е.

$f(\mathbf{x}) = a + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{G}\mathbf{x}$.

Одномерный поиск будем вести вдоль направлений, взаимно сопряженных по отношению к матрице $\mathbf{G}$.

В качестве первого направления поиска из первой точки $\mathbf{x}_1$ возьмем направление наискорейшего спуска

$$\mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_1 \tag{4.63}$$

и найдем значение λ_1, минимизирующее функцию

$f(\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{d}_1)$.

Положим

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \lambda_1\mathbf{d}_1 \tag{4.64}$$

и произведем поиск в направлении $\mathbf{d}_2$, сопряженном направлению $\mathbf{d}_1$ (выберем вектор $\mathbf{d}_2$ как линейную комбинацию векторов $\mathbf{d}_1$ и $-\mathbf{g}_2$), и найдем

$$\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_2 + \lambda_2\mathbf{d}_2 \tag{4.65}$$

минимизацией функции $f(\mathbf{x}_2 + \lambda\mathbf{d}_2)$. Направление поиска $\mathbf{d}_3$ из точки $\mathbf{x}_3$ выбирается сопряженным направлениям $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$. На $(k+1)$-м шаге выбираем $\mathbf{d}_{k+1}$ в виде линейной комбинации $-\mathbf{g}_{k+1}$, $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \ldots, \mathbf{d}_k$, сопряженной всем направлениям $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \ldots, \mathbf{d}_k$.

Таким образом, $\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \sum_{r=1}^{k} \alpha_r\mathbf{d}_r$, $k = 1, 2, \ldots$ Оказывается, все α_r равны нулю, за исключением α_k, так что

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \alpha_k \mathbf{d}_k \tag{4.66}$$

и

$$\alpha_k = \mathbf{g}_{k+1}^2/\mathbf{g}_k^2. \tag{4.67}$$

Прежде чем перейти к индуктивным рассуждениям, докажем справедливость соотношений (4.66) и (4.67) при $k = 1$. Поскольку $f(\mathbf{x}_2) = f(\mathbf{x}_1 + \lambda_1 \mathbf{d}_1)$ является минимумом функции $f(\mathbf{x}_1 + \lambda \mathbf{d}_1)$ на прямой, то

$$\mathbf{g}_2^T \mathbf{d}_1 = -\mathbf{g}_2^T \mathbf{g}_1 = 0. \tag{4.68}$$

Много раз мы уже получали этот результат раньше (соотношения (4.37), (4.22), (4.24)). Он, конечно, справедлив и для квадратичных функций

$$\mathbf{g}_2 = \mathbf{b} + \mathbf{G}\mathbf{x}_2, \; \mathbf{g}_1 = \mathbf{b} + \mathbf{G}\mathbf{x}_1.$$

Тогда, если $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2 = -\mathbf{g}_2 + \alpha_1 \mathbf{d}_1$ сопряжены, то

$$\mathbf{d}_2^T \mathbf{G}\mathbf{d}_1 = 0,$$

т. е.

$$-\mathbf{g}_2^T \mathbf{G}\mathbf{d}_1 + \alpha_1 \mathbf{d}_1^T \mathbf{G}\mathbf{d}_1 = 0,$$

следовательно,

$$\frac{(-\mathbf{g}_2^T - \alpha_1 \mathbf{g}_1^T)\,\mathbf{G}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)}{\lambda_1} = 0,$$

откуда

$$(-\mathbf{g}_2^T - \alpha_1 \mathbf{g}_1^T)(\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1) = 0.$$

Таким образом,

$$-\mathbf{g}_2^2 + \alpha_1 \mathbf{g}_1^2 = 0.$$

Остальные члены исчезают из соотношения (4.68), и, следовательно,

$$\alpha_1 = \mathbf{g}_2^2/\mathbf{g}_1^2,$$

что и требовалось доказать. Это как раз и есть соотношение (4.67) при $k = 1$.

Теперь перейдем к доказательству соотношений (4.66) и (4.67) по индукции, полагая, что векторы $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \ldots, \mathbf{d}_k$ получены описанным выше способом и являются взаимно сопряженными.

Точка $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ является минимумом функции $f(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k)$ на прямой $\mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$.

Тогда

$$\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{d}_k = 0. \tag{4.69}$$

Имеем

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k =$$

$$= \mathbf{x}_{k-1} + \lambda_{k-1} \mathbf{d}_{k-1} + \lambda_k \mathbf{d}_k \quad \text{и т. д.}$$

Таким образом,

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{j+1} + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i \mathbf{d}_i; \quad \text{при} \quad 1 \leqslant j \leqslant k-1, \tag{4.70}$$

следовательно,

$$\mathbf{G}\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{G}\mathbf{x}_{j+1} + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i \mathbf{G}\mathbf{d}_i,$$

тогда

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}} = \mathbf{g}_{j+1}^{\mathrm{T}} + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i \mathbf{d}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{G}, \quad \text{при} \quad 1 \leqslant j \leqslant k-1,$$

откуда

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}} \mathbf{d}_j = \mathbf{g}_{j+1}^{\mathrm{T}} \mathbf{d}_j + \sum_{i=j+1}^{k} \lambda_i \mathbf{d}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{G}\mathbf{d}_j.$$

В результате преобразований имеем $\mathbf{g}_{j+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_j = 0$ (в соответствии с соотношениями (4.68) и (4.69)) и из-за взаимной сопряженности $\mathbf{d}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{d}_j = 0$ при $j < i$. Таким образом, каждое слагаемое в правой части равно нулю.

Следовательно,

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_j = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \ldots, k-1 \tag{4.71}$$

и из соотношения (4.69) окончательно имеем

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_j = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \ldots k. \tag{4.72}$$

Таким образом, было доказано, что вектор $\mathbf{g}_{k+1}$ ортогонален каждому из векторов $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \ldots, \mathbf{d}_k$.

Можно также показать, что вектор $\mathbf{g}_{k+1}$ ортогонален векторам $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \ldots, \mathbf{g}_k$.

Из соотношения (4.72) имеем

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_j = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \ldots, k.$$

Так как из предположения в начале доказательства по индукции

$$\mathbf{d}_j = -\mathbf{g}_j + \alpha_{j-1}\mathbf{d}_{j-1},$$

то приведенное выше соотношение принимает вид

$$-\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_j + \alpha_{j-1}\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_{j-1} = 0,$$

следовательно, $-\mathbf{g}_{k+1}\mathbf{g}_j = 0$, поскольку $\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}_{j-1} = 0$ из соотношения (4.72).

Таким образом,

$$\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_j = 0 \quad \text{при } j = 1, 2, \ldots, k. \tag{4.73}$$

Доказательство по индукции будет закончено, если показать, что вектор $\mathbf{d}_{k+1}$, определенный в соотношении (4.66), сопряжен с векторами $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \ldots, \mathbf{d}_k$.

Для $j = 1, 2, \ldots, k-1$ имеем

$$\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_j = -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_j + \alpha_k\,\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_j =$$

$$= -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_j$$

в силу взаимной сопряженности.

Тогда

$$-\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_j = -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\,\frac{(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_j)}{\lambda_j} =$$

$$= -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\frac{(\mathbf{g}_{j+1} - \mathbf{g}_j)}{\lambda_j} =$$

$$= 0$$

с учетом соотношения (4.73).

Таким образом, $\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{d}_j = 0$ при $j = 1, 2, \ldots, k-1$, и это справедливо для любого α_k. Для завершения доказательства необходимо определить α_k так, чтобы выполнялось равенство

$\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}\mathbf{d}_k = 0$:

$$\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_k + \alpha_k\,\mathbf{d}_k^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_k =$$

$$= -\mathbf{g}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\frac{(\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)}{\lambda_k} + \alpha_k(-\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} + \alpha_{k-1}\,\mathbf{d}_{k-1}^{\mathrm{T}})\,\frac{(\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k)}{\lambda_k}.$$

Следовательно,

$$\mathbf{d}_{k+1}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{G}\mathbf{d}_k = \frac{-\mathbf{g}_{k+1}^2 + \alpha_k\,\mathbf{g}_k^2}{\lambda_k},$$

поскольку все другие члены из правой части исчезают в силу соотношений (4.72) и (4.73).

Следовательно, направление $\mathbf{d}_{k+1}$ будет сопряжено с направлением $\mathbf{d}_k$, если $\alpha_k = \mathbf{g}_{k+1}^2/\mathbf{g}_k^2$, что и требовалось доказать.

Таким образом, направление поиска в методе Флетчера – Ривса являются взаимно сопряженными и в данном методе минимум квадратичной функции n переменных можно найти не более чем за n шагов. Это означает, что одномерный поиск производится с нужной точностью и устраняются любые ошибки округления, которые могут возникнуть.

Вышеописанный метод будет применим и к неквадратичным функциям, так как если поиск осуществляется вблизи минимума, то можно надеяться на достижение квадратичной сходимости, когда имеет место квадратичная аппроксимация. Флетчер и Ривс полагают, что в этой ситуации каждое n-е

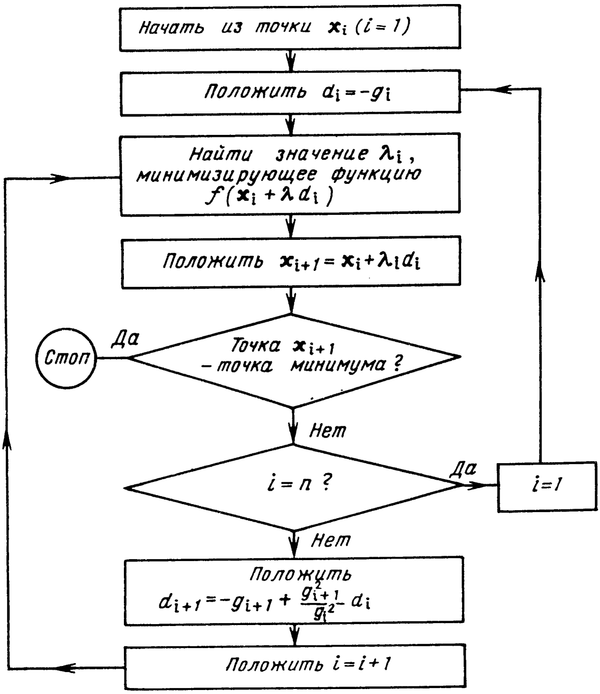

Рис. 4.5

направление поиска должно быть направлением наискорейшего спуска и при построении сопряженных направлений должен быть произведен *рестарт*.

Приведенные ниже блок-схема (рис. 4.5) и текст программы реализуют эту идею. В общем случае данный метод не столь эффективен, как метод ДФП, но тем не менее бывает весьма полезен.

```
100 PRINT "МИНИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ ФЛЕТЧЕРА-РИВСА"
120 REM ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ПРОИЗВОДИТСЯ КУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИЕЙ
150 REM ФУНКЦИЯ F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000
155 REM ЗНАЧЕНИЯ G(1),G(2),...,G(N) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 6000
200 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
220 DIM X(N),Y(N),P(N),Q(N),D(N),G(N)
300 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ"
320 FOR I=1 TO N:PRINT "X";I;:INPUT X(I):NEXT I:PRINT ""
340 REM ЗАДАТЬ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ СЧЕТЧИКОВ
350 SV=1:TV=0
360 REM ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ ВЫВОД
380 PRINT "              ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
550 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):PRINT "X";I;"=";X(I):NEXT I
560 GOSUB 5000:FP=Z:PRINT "Z="Z
570 GOSUB 6000:G1=G0:GK=G0
575 REM В КАЧЕСТВЕ ПЕРВОГО НАПРАВЛЕНИЯ ВЗЯТЬ
577 REM НАПРАВЛЕНИЕ НАИСКОРЕЙШЕГО СПУСКА
580 FOR I=1 TO N:D(I)=-G(I):NEXT I
585 REM K - СЧЕТЧИК ИТЕРАЦИЙ
```

```
590 K=1
600 GP=0
610 FOR I=1 TO N:GP=GP+G(I)*D(I):NEXT I
620 IF GP<=0 THEN GOTO 680
625 REM ОПРЕДЕЛИТЬ НАЧАЛЬНЫЙ ШАГ И,
627 REM ЕСЛИ НЕОБХОДИМО,ИЗМЕНИТЬ НАПРАВЛЕНИЕ СПУСКА НА ПРОТ
630 QX=ABS(2*FP/GP):IF QX>1 THEN  QX=1
640 FOR I=1 TO N
650 X(I)=P(I)-QX*D(I):P(I)=X(I):NEXT I
660 GOSUB 5000:FP=Z:PRINT "НЕСТАБИЛЬНОСТЬ"
670 GOSUB 6000:G1=G0:GOTO 600
680 QX=ABS(2*FP/GP):IF QX>1 THEN QX=1
690 HH=QX
700 REM НАЙТИ СЛЕДУЮЩУЮ ТОЧКУ
710 BB=HH
720 FOR I=1 TO N
730 Q(I)=P(I)+BB*D(I):X(I)=Q(I)
740 NEXT I
750 GOSUB 5000:FQ=Z
760 GOSUB 6000:G2=G0
770 GQ=0
780 FOR I=1 TO N
790 GQ=GQ+G(I)*D(I)
800 NEXT I
810 IF GQ>0 OR FQ>FP THEN GOTO 860
815 REM ВЫПОЛНИТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ,
817 REM УДВОИТЬ ШАГ И ПЕРЕЙТИ К ТОЧКЕ Q,
818 REM ИЛИ УДВОИТЬ ШАГ, ЧТОБЫ "НАКРЫТЬ" МИНИМУМ
820 HH=2*HH
830 FOR I=1 TO N:P(I)=Q(I):NEXT I
840 FP=FQ:GP=GQ:G1=G2
850 GOTO 710
860 ZZ=3*(FP-FQ)/HH:ZZ=ZZ+GP+GQ
870 WW=ZZ*ZZ-GP*GQ:IF WW<0 THEN WW=0
880 W=SQR(WW)
890 DD=HH*(1-(GQ+W-ZZ)/(GQ-GP+2*W))
900 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+DD*D(I):NEXT I
910 GOSUB 5000:FR=Z
920 GOSUB 6000:G3=G0
925 REM НАЙТИ ГРАДИЕНТ В НОВОЙ ТОЧКЕ
930 GR=0
940 FOR I=1 TO N:GR=GR+G(I)*D(I):NEXT I
950 IF Z<=FP AND Z<=FQ THEN GOTO 1100
960 IF GR>0 THEN GOTO 1020
990 HH=HH-DD
1000 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):NEXT I
1010 FP=Z:GP=GR:GOTO 860
1020 HH=DD
1030 FOR I=1 TO N:Q(I)=X(I):NEXT I
1040 FQ=Z:GQ=GR:GOTO 860
1100 REM ПРОВЕРКА КРИТЕРИЯ ЗАВЕРШЕНИЯ
1110 IF G3<.000001 THEN GOTO 1300
1120 IF K=N THEN GOTO 1250
1130 REM УВЕЛИЧИТЬ СОДЕРЖИМОЕ СЧЕТЧИКА ИТЕРАЦИЙ
1140 K=K+1
1150 REM НАЙТИ СОПРЯЖЕННОЕ НАПРАВЛЕНИЕ
1160 AK=G3*G3/(GK*GK)
1170 FOR I=1 TO N:D(I)=-G(I)+AK*D(I):P(I)=X(I):NEXT I
1200 PRINT "НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ";:DV=DV+1:PRINT "        ПОИСКА";DV
1210 FP=Z:G1=G0:GK=G0
1220 FOR I=1 TO N:PRINT "X";I;"=";X(I):NEXT I:PRINT "Z=";Z
1230 GOTO 600
1250 PRINT "РЕСТАРТ";:SV=SV+1:DV=DV+1
1260 PRINT "            ИТЕРАЦИЯ";SV;"  ПОИСК";DV
1270 PRINT ""
1280 GOTO 550
```

```
1300 PRINT "МИНИМУМ НАЙДЕН"
1320 FOR I=1 TO N:PRINT "X";I;"=";X(I):NEXT I
1340 PRINT "МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН "Z
1350 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО ";TV
1400 END
5000 Z=100*(X(2)-X(1)*X(1))^2
5010 Z=Z+(1-X(1))^2
5020 TV=TV+1
5200 RETURN
6000 G0=0
6100 G(1)=-400*X(1)*(X(2)-X(1)*X(1))
6110 G(1)=G(1)-2*(1-X(1))
6200 G(2)=200*(X(2)-X(1)*X(1))
7000 FOR I=1 TO N:G0=G0+G(I)*G(I):NEXT I
7010 G0=SQR(G0)
7500 RETURN
```

Пример 1

Используя метод Флетчера – Ривса с начальной точкой (–1,2; 1), минимизировать функцию Розенброка

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2.$$

Начальная точка (–1,2; 1) особенно неудобна для данной функции, да и функция сама по себе весьма сложна для оптимизации. Минимум ее находится в точке (1; 1). Ниже приведены начало и конец распечатки результата работы программы:

```
МИНИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ ФЛЕТЧЕРА-РИВСА
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 2
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1 -1.2
X 2  1

          ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1 =-1.2
X 2 = 1
Z= 24.20001
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ      ПОИСКА 1
X 1 =-1.0302
X 2 = 1.069306
Z= 4.128102
РЕСТАРТ         ИТЕРАЦИЯ 2   ПОИСК 2



X 1 =-.7342701
X 2 = .4632753
Z= 3.583429
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ      ПОИСКА 3
X 1 =-.6921596
X 2 = .4880884
Z= 2.871511
РЕСТАРТ         ИТЕРАЦИЯ 3   ПОИСК 4



X 1 =-.5967852
X 2 = .3241929
Z= 2.651865
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ      ПОИСКА 5
X 1 =-.5726343
X 2 = .3384563
Z= 2.484301
```

```
РЕСТАРТ         ИТЕРАЦИЯ 45   ПОИСК 88

X 1 = .9999818
X 2 = .9999634
Z= 3.34083E-10
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ       ПОИСКА 89
X 1 = .9999818
X 2 = .9999634
Z= 3.330172E-10
РЕСТАРТ         ИТЕРАЦИЯ 46   ПОИСК 90

X 1 = .9999821
X 2 = .9999643
Z= 3.250769E-10
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ       ПОИСКА 91
X 1 = .9999822
X 2 = .9999642
Z= 3.190373E-10
РЕСТАРТ         ИТЕРАЦИЯ 47   ПОИСК 92

X 1 = .9999822
X 2 = .9999643
Z= 3.179714E-10
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ       ПОИСКА 93
X 1 = .9999823
X 2 = .9999644
Z= 3.165788E-10
МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = 1
X 2 = 1
МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  0
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  250
```

Пример 2

Найти минимум функции

$$f(x_1, x_2, x_3) = 3(x_1 - 1)^2 + 2(x_2 - 2)^2 + (x_3 - 3)^2.$$

По сравнению с примером 1 это тривиальная задача. В качестве начальной точки выбрана точка (9; −7; 11). Приведенная ниже распечатка результатов работы программы иллюстрирует (в соответствии с теорией) тот факт, что с помощью метода Флетчера – Ривса можно найти минимум за три итерации.

```
МИНИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ ФЛЕТЧЕРА-РИВСА
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 3
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1  9
X 2 -7
X 3  11

         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1 = 9
X 2 =-7
X 3 = 11
Z= 418
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ       ПОИСКА 1
X 1 =-.481967
X 2 = .1114755
X 3 = 7.839344
Z= 37.14098
НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ       ПОИСКА 2
X 1 = 1.206897
X 2 = 2.827586
X 3 = 4.862069
Z= 4.965516
```

```
МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = .9999999
X 2 = 2
X 3 = 3
МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  4.263257E-14
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  7
```

4.5. ЛИТЕРАТУРА

За последние двадцать лет проводились активные исследования градиентных методов. Было опубликовано много статей, и достигнуты значительные успехи. В данной главе рассмотрено всего лишь три из множества методов, которые были предложены за этот период. Фундаментальными являются идеи сопряженных направлений и свойство квадратичных функций, описанное соотношением (4.17). В разд. 4.3 было упомянуто, что обновление матрицы **H** в методе ДФП не является единственно возможным. Существует целое семейство методов, основанных на этих идеях, среди которых методы Давидона – Флетчера – Пауэлла и Флетчера – Ривса являются лишь двумя частными случаями. Приведенная ниже литература представляет собой всего лишь часть из того множества публикаций, которое следовало бы упомянуть.

1 C. G. Broyden, 'Quasi-Newton methods and their application to function minimisation', *Maths. of Comp.*, **21**, 368–381, 1967.

2 C. G. Broyden, 'The convergence of single-rank quasi-Newton methods', *Maths. of Comp.*, **24**, 376–382, 1970.

3 R. Fletcher, 'A new approach to variable metric algorithms', *The Comp. Journal*, **13**, 317–322, 1970.

4 R. Fletcher and M. J. D. Powell, 'A rapidly convergent descent method for minimisation', *The Comp. Journal*, **6**, 163–168, 1963.
[Имеется перевод: Р. Флетчер, М. Пауэлл. Быстросходящийся метод спуска. ГПНТБ, перевод П-59064.]

5 R. Fletcher and C. M. Reeves, 'Function minimisation by conjugate gradients', *The Comp. Journal*, **7**, 149–154, 1964.

6 H. Y. Huang, 'Unified approach to quadratically convergent algorithms for function minimisation', *J. Opt. Theory App.*, **5**, 405–423, 1970.

7 H. Y. Huang and A. V. Levy, 'Numerical experiments on quadratically convergent algorithms for function minimisation', *J. Opt. Theory App.*, **6**, 269–282, 1970.

8 M. J. D. Powell, 'On the convergence of the variable metric algorithm', *J. Inst. Maths. App.*, **7**, 21–36, 1971.

9 M. J. D. Powell, 'Quadratic termination properties of minimisation algorithms. I. Statement and discussion of results', *J.Inst. Maths. App.*, **10**, 333–342, 1972.

10 M. J. D. Powell, 'Quadratic termination properties of minimisation algorithms. II. Proofs of theorems', *J. Inst. Maths. App.*, **10**, 343–357, 1972.

4.6. УПРАЖНЕНИЯ

1. Измените программу метода наискорейшего спуска, приведенную в разд. 4.1, так, чтобы она могла выполнять линейный поиск методом Фибоначчи, методом "золотого сечения", методом кубической интерполяции. Примените полученную программу в решении задач, приведенных в примерах. Обратите внимание на любые возникающие трудности.

2. Попробуйте решить примеры 1 и 2 разд. 4.1, используя различные начальные точки. Появились ли какие-нибудь трудности?

3. Пусть $\mathbf{P}_0$, $\mathbf{P}_1$ и $\mathbf{P}_2$ – следующие друг за другом точки, полученные методом наискорейшего спуска. Предполагается, что расчеты будут проводиться быстрее, если следующий поиск произвести в направлении $\mathbf{P}_0\mathbf{P}_2$. Нарисуйте линии постоянного уров-

ня вблизи минимума для иллюстрации приведенных выше соображений. Отразите эту идею в программе, приведенной в разд. 4.1.

4. Если $f(\mathbf{x})$ – положительно определенная квадратичная функция двух переменных, минимум которой находится в точке $(0;\ 0)$, а $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ – три точки, полученные последовательно методом наискорейшего спуска, то покажите, что прямая, проходящая через точки $\mathbf{x}_0$ и $\mathbf{x}_2$, проходит через точку минимума функции. (См. метод ускорения расчетов, описанный в упр. 3.)

5. Рассмотрите квадратичную функцию $f(x, y) = x^2/a^2 + y^2/b^2$, где a и b – константы. Линиями постоянного уровня функции являются эллипсы

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = c^2,$$

где c^2 – значение функции. Минимум функции равен нулю и находится в начале координат. Покажите, что прямая

$$y = mx \pm c\sqrt{(a^2 m^2 + b^2)}$$

направлена по касательной к этому эллипсу и касается его в точке $\mathbf{P}$ с координатами

$$\left[\pm\frac{ma^2 c}{\sqrt{(a^2 m^2 + b^2)}}, \pm\frac{cb^2}{\sqrt{(a^2 m^2 + b^2)}}\right].$$

Следовательно, поиск из точки на этой прямой вдоль нее завершится в точке минимума функции $\mathbf{P}$. Градиент прямой, соединяющей точку $\mathbf{P}$ с началом координат (точкой минимума), равен m'. Покажите, что $mm' = -b^2/a^2$.

Покажите, что это эквивалентно соотношению

$$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix} 1/a^2 & 0 \\ 0 & 1/b^2 \end{pmatrix}\mathbf{q} = 0$$

где $\mathbf{p}^{\mathrm{T}} = (\cos\alpha; \sin\alpha)$; $\mathbf{q}^{\mathrm{T}} = (\cos\beta, \sin\beta)$ и $m = \operatorname{tg}\alpha$, $m' = \operatorname{tg}\beta$. Следовательно, $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ – сопряженные векторы и поиск вдоль вектора $\mathbf{p}$, а затем вдоль вектора $\mathbf{q}$ позволяет найти минимум за две итерации.

6. Минимизируйте функцию

$$f(\mathbf{x}) = 3(x_1 - 4)^2 + 5(x_2 + 3)^2 + 7(2x_3 + 1)^2,$$

используя: метод ДФП; метод Флетчера – Ривса. Покажите, что независимо от начальной точки для нахождения минимума в первом случае потребовалось три итерации, а во втором – три поиска.

7. Минимизируйте функцию

$$f(x_1, x_2) = 1 - 2x_1 - 2x_2 - 4x_1 x_2 + 10x_1^2 + 2x_2^2.$$

8. Минимизируйте функцию

$$x_1^4 + x_2^4 + 2x_1^2 x_2^2 - 4x + 3.$$

9. Минимизируйте функцию

$$(x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2.$$

10. Минимизируйте функцию

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^2 - 3x_1 - 2x_2 + 2.$$

ЧАСТЬ II

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЙ

ГЛАВА 5. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

5.1. ОГРАНИЧЕНИЯ В ВИДЕ РАВЕНСТВ

Рассмотрим задачу минимизации функции двух переменных

$$z = f(x, y),$$

где на x и y наложено ограничение, задаваемое уравнением

$$g(x, y) = 0. \tag{5.1}$$

Вообще, уравнение $g(x, y) = 0$ можно разрешить относительно y как функцию от x, т. е. $y = h(x)$. Конечно, на практике может оказаться трудным или даже невозможным найти явный вид функции $h(x)$. При выполнении определенных условий дифференцируемости производная функции $h(x)$

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} h(x) = -\frac{\partial g}{\partial x}\bigg/\frac{\partial g}{\partial y}. \tag{5.2}$$

Тогда функцию

$$z = f(x, y) = f[x, h(x)] \tag{5.3}$$

можно записать как функцию одной независимой переменной x. Необходимым условием минимума функции z будет соотношение

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = 0,$$

т. е.

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \left(\frac{-\dfrac{\partial f}{\partial y}}{\dfrac{\partial g}{\partial y}}\right) \cdot \frac{\partial g}{\partial x} = 0. \tag{5.4}$$

Соотношения (5.1) и (5.2) могут быть решены с целью получения значений x^*, y^* в точке минимума.

Этот результат может быть представлен в иной форме. Если положить

$$\lambda = \frac{-\partial f}{\partial y}(x, y) \Big/ \frac{\partial g}{\partial y}(x, y) \qquad (5.5)$$

при $x = x^*$, $y = y^*$, то в точке минимума выполняются соотношения

$$g(x, y) = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) + \lambda \frac{\partial g}{\partial x}(x, y) = 0,$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) + \lambda \frac{\partial g}{\partial y}(x, y) = 0,$$

причем последнее следует непосредственно из соотношения (5.5).

Получить эти три необходимых условия можно, используя *функцию Лагранжа*

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y), \qquad (5.6)$$

которая представляет собой сумму целевой функции и произведения множителя Лагранжа λ на функции ограничения. Тогда необходимые условия минимума функции $f(x, y)$ при наличии ограничений могут быть записаны в следующем виде:

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial F}{\partial x}(x, y, \lambda) = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) + \lambda \frac{\partial g}{\partial x}(x, y) = 0, \\ &\frac{\partial F}{\partial y}(x, y, \lambda) = \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) + \lambda \frac{\partial g}{\partial y}(x, y) = 0, \\ &\frac{\partial F}{\partial \lambda}(x, y, \lambda) = g(x, y) = 0. \end{aligned}\right\} \qquad (5.7)$$

Это система трех уравнений, решениями которой являются значения x^*, y^* и λ^* – в точке минимума.

Пример 1

Найти минимум функции $f(x, y) = x^2 + y^2$ при ограничении $x + y = 4$.

Функция Лагранжа имеет вид

$$F(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(4 - x - y).$$

Соответствующие условия минимума можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 2x - \lambda = 0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 2y - \lambda = 0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = 4 - x - y = 0.$$

Решением этой системы уравнений являются $x = y = 2$, $\lambda = 4$. Минимум функции равен 8. Читателю в качестве упражнения предлагается проверить этот результат, рассмотрев функцию одной переменной x, которая получена исключением y из функции Лагранжа:

$$z = x^2 + (4 - x)^2.$$

Необходимые условия минимума (5.7) могут быть обобщены для функций n переменных при наличии m ограничений в виде равенств.

Рассмотрим задачу минимизации функции

$$z = f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n),$$

где на переменную $\mathbf{x}$ наложены ограничения

$$g_1(\mathbf{x}) = 0,\ g_2(\mathbf{x}) = 0, \ldots, g_m(\mathbf{x}) = 0. \qquad (5.8)$$

Ограничения можно использовать для того, чтобы выразить m переменных (без ограничения общности их можно обозначить $x_1, x_2, \ldots, x_m$) через остальные $(n - m)$ переменных, которые можно рассматривать как независимые переменные. В точке минимума при наличии ограничений $f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{x}) \geqslant 0$ для всех $\mathbf{h}$, удовлетворяющих условию $g_i(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = g_i(\mathbf{x}) = 0$ при $i = 1, \ldots, m$.

Тогда с точностью до первого порядка h_j будем иметь

$$\sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial f}{\partial x_j} = 0,$$

где

$$\sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при } i = 1, 2, \ldots, m.$$

Это условие можно записать иначе:

$$\sum_{j=1}^{n} h_j \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \right) = 0, \qquad (5.9)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$ – множители Лагранжа.

Поскольку $h_{m+1}, h_{m+2}, \ldots, h_n$ являются независимыми приращениями, коэффициенты при них должны быть равны нулю, т. е.

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{при} \quad j = m + 1, \ldots, n.$$

Приращения $h_1, h_2, \ldots, h_m$ не являются независимыми, и их можно положить равными нулю выбором множителей Лагранжа в уравнении (5.9).

Таким образом, мы выбираем множители $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$ такими, чтобы

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \text{ при } j = 1, 2, \ldots, m.$$

Тогда окончательно будем иметь

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\frac{\partial g_i}{\partial x_j}=0 \quad \text{при} \quad j=1,2,\ldots,n. \tag{5.10}$$

Следовательно, если определить функцию Лагранжа в виде

$$F(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})=f(\mathbf{x})+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(\mathbf{x}), \tag{5.11}$$

то необходимые условия минимума функции $f(\mathbf{x})$ при наличии ограничений можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}=\frac{\partial f}{\partial x_j}+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\frac{\partial g_i}{\partial x_j}=0 \quad \text{при} \quad j=1,2,\ldots,n, \tag{5.12}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i}=g_i(\mathbf{x})=0 \quad \text{при} \quad i=1,\ldots,m. \tag{5.13}$$

Отметим, что для допустимых значений $\mathbf{x}$ (таких, которые удовлетворяют ограничениям) справедливо соотношение

$$F(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})=f(\mathbf{x})+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i g_i(\mathbf{x})=f(\mathbf{x}).$$

В точке минимума при наличии ограничений на значение $\mathbf{x}^*$ можно записать, что $f(\mathbf{x}^*+\mathbf{h})-f(\mathbf{x}^*)\geqslant 0$, где $\mathbf{h}$ удовлетворяет уравнению $g_i(\mathbf{x}^*+\mathbf{h})=0$ для всех i.

Таким образом,

$$F(\mathbf{x}^*+\mathbf{h})-F(\mathbf{x}^*)=\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial F}{\partial x_j}h_j+\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}h_i\frac{\partial^2 F}{\partial x_i\,\partial x_j}h_j+\cdots\geqslant 0,$$

где производные вычислены в точке $\mathbf{x}^*$ при $\lambda=\lambda^*$.

С учетом уравнения (5.12) получим для всех $\mathbf{h}$, удовлетворяющих ограничениям, что

$$\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}h_i\frac{\partial^2 F}{\partial x_i\,\partial x_j}h_j\geqslant 0.$$

Достаточными условиями минимума при наличии ограничений являются уравнения (5.12) и (5.13), а также положительная определенность квадратичной формы

$$\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}h_i\frac{\partial^2 F}{\partial x_i\,\partial x_j}h_j \tag{5.14}$$

для значений $\mathbf{h}$, удовлетворяющих ограничениям.

Замечание. Не всегда просто привести квадратичную форму к виду, пригодному для использования.

Пример 2

Проверьте, что точка (2; 2) является минимумом функции $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$ при ограничении $x_1 + x_2 = 4$.

Для $F(\mathbf{x}, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda(4 - x_1 - x_2)$ были получены решения

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0 \quad \text{при } x_1 = x_2 = 2 \text{ и } \lambda = 4.$$

Матрица Гессе функции F имеет вид $\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ и, следовательно, положительно определена, а это доказывает, что точка (2; 2) является точкой минимума.

5.2. ОГРАНИЧЕНИЯ В ВИДЕ НЕРАВЕНСТВ

В этом разделе метод множителей Лагранжа будет распространен на ограничения в виде неравенств. Рассмотрим общую задачу математического программирования:

минимизировать функцию $f(\mathbf{x})$

при наличии m ограничений $g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i$ $(i = 1, 2, \ldots, m)$. Причем такие огра-

Причем такие ограничения не ограничивают общности. (Ограничение $\varphi(\mathbf{x}) \geqslant c$ можно записать в виде $-\varphi(\mathbf{x}) \leqslant -c$.)

В настоящее время нет метода, гарантирующего существование решения любой подобной задачи. Возможно, читатель предложит такой метод.

Ограничения в виде неравенств могут быть преобразованы в ограничения в виде равенств добавления к каждому из них неотрицательной *ослабляющей переменной* u_i^2 (отметим, что переменная u_i^2 всегда положительна):

$$g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 = b_i$$

или

$$g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 - b_i = 0. \tag{5.15}$$

Таким образом, задача сводится к минимизации функции $f(\mathbf{x})$ при наличии m ограничений в виде равенства $g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 - b_i = 0$. Следуя изложенному в предыдущем разделе методу, сформируем функцию Лагранжа

$$F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i [g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 - b_i]. \tag{5.16}$$

Необходимыми условиями, которые должны выполняться в стационарной точке, являются следующие:

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = 0 = \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \quad \text{при} \quad j = 1, 2, \ldots, n, \tag{5.17}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = 0 = g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 - b_i \quad \text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{5.18}$$

$$\frac{\partial F}{\partial u_i} = 0 = 2\lambda_i u_i \quad \text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, m. \tag{5.19}$$

Умножив последнее уравнение на $u_i/2$, получим

$$\lambda_i u_i^2 = 0,$$

т. е.

$$\lambda_i [b_i - g_i(\mathbf{x})] = 0 \quad \text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, m. \tag{5.20}$$

Уравнения (5.17), (5.18) и (5.20) являются необходимыми условиями минимума в точке $\mathbf{x}^*$ при наличии ограничений. Уравнения (5.18) являются повторной записью ограничений $g_i(\mathbf{x}) \leqslant 0$. Уравнение (5.20) означает, что либо $\lambda_i = 0$, либо $b_i - g_i(\mathbf{x}^*) = 0$. Если $\lambda_i \neq 0$, то $g_i(\mathbf{x}^*) = b_i$ и ограничение является *активным* и представляет собой ограничение в виде равенства. С другой стороны, если ограничение является ограничением в виде строгого неравенства $g_i(\mathbf{x}^*) < b_i$, то соответствующий множитель Лагранжа $\lambda_i = 0$. В самом деле, если $g_i(\mathbf{x}^*) < b_i$, то рассматривается минимум, удовлетворяющий ограничению, которое является неактивным, и которым можно пренебречь, а соответствующие множители $\lambda_i = 0$. Конечно, предварительно не известно, какими ограничениями можно пренебречь.

Есть также дополнительное условие, которое должно быть выполнено в точке минимума при наличии ограничений, а именно $\lambda_i \geqslant 0$.

Предположим, что уравнения (5.17), (5.18) и (5.20) справедливы в точке $(\mathbf{x}^*;\ \lambda^*;\ \mathbf{u}^*)$. Если фактический минимум функции при наличии ограничений $\mathbf{z} = f(\mathbf{x}^*)$, то можно рассматривать z как функцию от b_i и изменения b_i будут изменять ограничения и, таким образом, изменять саму функцию z. Покажем, что

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} = -\lambda_i^*,$$

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_j} \, \frac{\partial x_j}{\partial b_i}, \tag{5.21}$$

где частные производные вычисляются в точке $\mathbf{x}^*$.

Поскольку $g_k(\mathbf{x}) + u_k^2 = b_k$, то

$$\frac{\partial g_k}{\partial b_i} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \, \frac{\partial x_j}{\partial b_i} = \begin{cases} 0, & \text{если } i \neq k, \\ 1, & \text{если } i = k. \end{cases}$$

Тогда

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k^* \frac{\partial g_k}{\partial b_i} = \frac{\partial z}{\partial b_i} + \lambda_i^* = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k^* \frac{\partial g_k}{\partial x_j} \right) \frac{\partial x_j}{\partial b_i}.$$

Но это выражение равно нулю в соответствии с уравнением (5.17). Таким образом,

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} = -\lambda_i^*.$$

С возрастанием b_i область ограничений расширяется, что не может привести к увеличению значения z – минимума функции $f(\mathbf{x})$, находящегося внутри области ограничений, а может лишь уменьшить его. Таким образом,

$$\frac{\partial z}{\partial b_i} \leqslant 0,$$

т. е.

$$\lambda_i^* \geqslant 0. \tag{5.22}$$

Необходимые условия минимума функции $f(\mathbf{x})$ при наличии ограничений $g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i$ $(i = 1, 2, \ldots, m)$ имеют такой вид, что можно найти $\mathbf{x}$ и $\boldsymbol{\lambda}$, для которых

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = 0 \quad &\text{при} \quad j = 1, \ldots, n, \\ g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i \quad &\text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, m; \\ \lambda_i[g_i(\mathbf{x}) - b_i] = 0 \quad &\text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, m, \\ \lambda_i \geqslant 0 \quad &\text{при} \quad i = 1, \ldots, m. \end{aligned}\right\} \tag{5.23}$$

(Знак λ_i меняется на противоположный, если рассматривается максимум.) Эти условия известны как условия Куна – Такера.

Пример 1

Написать условия Куна – Такера для минимума функции $f(\mathbf{x}) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$ и $x_1 + x_2 \geqslant 4$.

Эту задачу можно представить следующим образом:

минимизировать функцию

$$f(\mathbf{x}) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$$

при ограничениях $-x_1 \leqslant 0$, $-x_2 \leqslant 0$, $-x_1 - x_2 \leqslant -4$. Функция Лагранжа $F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$ будет иметь вид

$$F = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 + \lambda_1(u_1^2 - x_1) + \lambda_2(u_2^2 - x_2) + \lambda_3(u_3^2 - x_1 - x_2 + 4).$$

Необходимым условием минимума являются

$$\begin{aligned} &6x_1 + 4x_2 - \lambda_1 - \lambda_3 = 0, \\ &4x_1 + 10x_2 - \lambda_2 - \lambda_3 = 0, \\ &-x_1 \leqslant 0, \; -x_2 \leqslant 0, \; -x_1 - x_2 \leqslant -4, \\ &\lambda_1 x_1 = 0, \; \lambda_2 x_2 = 0, \; \lambda_3(4 - x_1 - x_2) = 0, \\ &\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

Нетрудно проверить, что эти условия выполняются при $x_1 = 3$, $x_2 = 1$, $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3^* = 22$ и функция имеет минимум, равный 44 в точке A с координатами (3; 1).

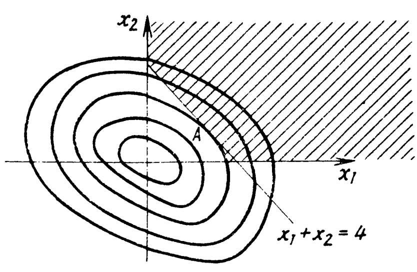

Рис. 5.1

Линиями постоянного уровня функции $f(\mathbf{x})$ являются эллипсы

$3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2 = c.$

Минимум функции $f(\mathbf{x})$ при отсутствии ограничений равен нулю и находится в начале координат. Область ограничений показана теневым контуром на рис. 5.1, иллюстрирующем настоящую задачу.

5.3. ВЫПУКЛОСТЬ И ВОГНУТОСТЬ

Общая задача математического программирования, сформулированная в начале предыдущего раздела, является очень сложной и до сих пор не имеет полного решения. Некоторые трудности встречаются в задачах, графически проиллюстрированных рис. 5.2. На рисунке изображены линии постоянного уровня функции. По мере перемещения от точки $\mathbf{x}^*$ – точки минимума функции при отсутствии ограничений – значения функции будут расти. На рис. 5.2 показаны также границы области ограничений $g_i(\mathbf{x}) = b_i$, а сама область заштрихована.

На рис. 5.2, *а* минимум функции при наличии ограничений совпадает с минимумом функции без ограничений. Все ограничения имеют вид строгих неравенств, и, *зная это*, можно было бы пренебречь ограничениями и решить за-

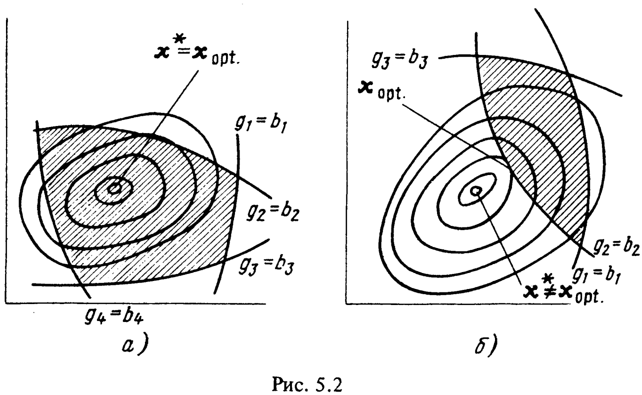

Рис. 5.2

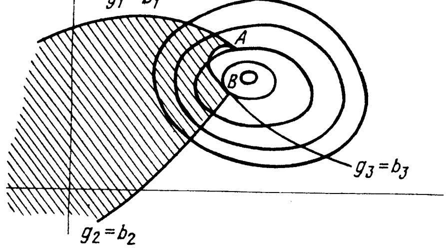

Рис. 5.3

дачу методами, изложенными в ч. I этой книги. На рис. 5.2, *б* точка минимума при наличии ограничений лежит на кривой $g_2(\mathbf{x}) = \mathbf{b}_2$, а два других ограничения неактивны. *Зная это*, можно было бы пренебречь ограничениями g_1 и g_3 и решить эту задачу как задачу с ограничениями в виде равенств, учитывая только ограничение $g_2(\mathbf{x}) = b_2$. Из этого следует, что в точке минимума $\mathbf{x}$ при наличии ограничений справедливо соотношение $\nabla f(\mathbf{x}) = \lambda \nabla g_2(\mathbf{x})$, поскольку направление $\nabla f(\mathbf{x})$ перпендикулярно линии постоянного уровня и границе области ограничений в данной точке. (Сравните с уравнением (5.17).)

Возможно, что наличие ограничений будет приводить к появлению локального минимума. Это может произойти даже в том случае, когда функция имеет только одну точку минимума при отсутствии ограничений. Такая ситуация иллюстрируется рис. 5.3.

Функция имеет только одну точку минимума при отсутствии ограничений. Однако для задачи с ограничениями обе точки A и B являются локальными минимумами, поскольку ни в одной из допустимых точек в ближайших окрестностях A или B функция не принимает меньших значений.

Некоторые из рассмотренных трудностей устраняются, если ограничиться случаем, когда область ограничений выпукла, а минимизируемая (максимизируемая) функция выпукла (вогнута).

Определим эти термины. Область является *выпуклой*, если отрезок прямой, соединяющей любые две точки области, принадлежит этой области. Следовательно, если $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ находятся в этой области, то любая точка вида $\theta \mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1$, где $0 < \theta < 1$, находится в этой же области. На рис. 5.4, *а* изображена выпуклая область, а на рис. 5.4, *б* – невыпуклая.

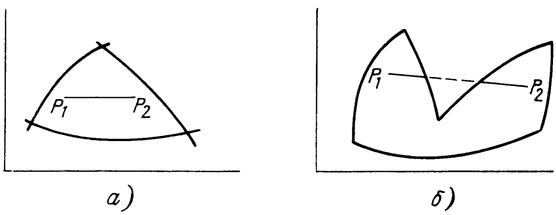

Рис. 5.4

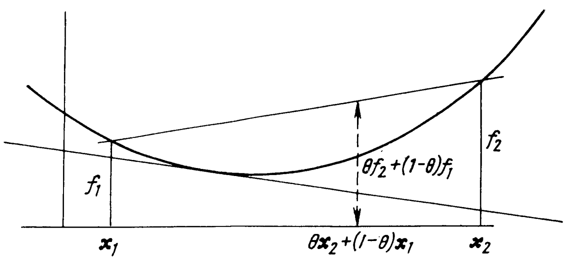

Рис. 5.5

Функция $f(\mathrm{x})$ является *выпуклой* на выпуклой области X, если для любых двух точек $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X$ выполняется соотношение

$$f[\theta \mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1] \leqslant \theta f(\mathbf{x}_2) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_1) \text{ при } 0 < \theta < 1. \tag{5.24}$$

Для функции одной переменной это означает, что она лежит ниже хорды, соединяющей любые две точки ее графика (рис. 5.5).

Для *вогнутой* функции, определенной на выпуклом множестве, следует изменить знак неравенства, в результате чего получим соотношение

$$f[\theta \mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1] \geqslant \theta f(\mathbf{x}_2) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_1). \tag{5.25}$$

Такая функция лежит выше хорды, соединяющей любые две точки ее графика.

Если в соотношениях (5.24) и (5.25) неравенства заменить на строгие неравенства, то функция $f(\mathbf{x})$ будет строго выпуклой или строго вогнутой.

Есть еще два важных свойства выпуклых (вогнутых) функций, которые можно вывести из соотношений (5.24) и (5.25).

Если функция $f(\mathbf{x})$ выпукла на выпуклой области X и $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X$, то

$$f(\mathbf{x}_2) \geqslant f(\mathbf{x}_1) + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \nabla f(\mathbf{x}_1). \tag{5.26}$$

Для вогнутых функций знак неравенства меняется на противоположный, что устанавливается следующим образом. Поскольку $f(\mathbf{x})$ выпукла, то для $0 < \theta < 1$ справедливо соотношение

$$f[\theta \mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1] \leqslant \theta f(\mathbf{x}_2) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_1),$$

следовательно,

$$f[\mathbf{x}_1 + \theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)] - f(\mathbf{x}_1) \leqslant \theta[f(\mathbf{x}_2) - f(\mathbf{x}_1)]$$

и

$$f(\mathbf{x}_2) \geqslant f(\mathbf{x}_1) + \frac{f[\mathbf{x}_1 + \theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)] - f(\mathbf{x}_1)}{\theta}.$$

Но по теореме о среднем

$$f[\mathbf{x}_1 + \theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)] = f(\mathbf{x}_1) + \theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \nabla f[\mathbf{x}_1 + \lambda\theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)],$$

где $0 < \lambda < 1$, т. е. производная вычисляется в некоторой точке, лежащей между точками $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_1 + \theta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)$.

Следовательно,

$$f(\mathbf{x}_2) \geqslant f(\mathbf{x}_1) + (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \nabla f[\mathbf{x}_1 + \theta\lambda(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)]$$

и при $\theta \to 0$ получаем соотношение (5.26).

Из соотношения (5.26) следует, что выпуклые функции одной переменной (двух переменных) лежат выше любой касательной (плоскости) к данной функции (см. рис. 5.5).

Функция выпукла, если гессиан

$$\mathbf{H} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i\, \partial x_j}\right)$$

положительно определен. По теореме Тейлора можно записать

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_1) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \nabla f(\mathbf{x}_1) + \tfrac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \mathbf{H}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1),$$

где $\mathbf{H}$ вычисляется в точке $\mathbf{x}_1 + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)$ и $0 < \lambda < 1$.

Таким образом, достаточно показать, что положительно определенная квадратичная функция $\frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}\mathbf{x}$ является выпуклой. Это сделать несложно. Пусть $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ – произвольные значения $\mathbf{x}$ и пусть $\bar{\mathbf{x}} = \theta\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1$, где $0 < \theta < 1$.

Тогда

$$\bar{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}} - \theta\mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_2 - (1 - \theta)\mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_1 =$$

$$= \theta^2 \mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_2 + 2\theta(1 - \theta)\mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_1 + (1 - \theta)^2 \mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_1 - \theta\mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_2 - (1 - \theta)\mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_1 =$$

$$= -\theta(1 - \theta)(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \mathbf{H}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1).$$

Так как $0 < \theta < 1$, то $(1 - \theta) > 0$, и если матрица $\mathbf{H}$ положительно определена, то $-\theta(1 - \theta) \leqslant 0$. Следовательно,

$$[\theta\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1]^{\mathrm{T}} \mathbf{H}[\theta\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1] \leqslant \theta\mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{H}\mathbf{x}_1. \tag{5.27}$$

Для выпуклых функций одной переменной это означает, что вторая производная неотрицательна, поэтому первая производная является возрастающей функцией, которая может быть равна нулю только в одной точке. Следовательно, такая функция может иметь только одну точку минимума.

Пример 1

Показать, что если $g_i(\mathbf{x})$ при $i = 1, 2, \ldots, m$ – выпуклые функции на выпуклой области X, то $\Sigma\lambda_i g_i(\mathbf{x})$, где $\lambda_i \geqslant 0$, также выпукла.

Пусть

$$h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x}).$$

Тогда если $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X$, то

$$h[\theta\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1] = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i[\theta\mathbf{x}_2 + (1 - \theta)\mathbf{x}_1] \leqslant$$

$$\leqslant \sum_{i=1}^{m} \lambda_i[\theta g_i(\mathbf{x}_2) + (1 - \theta)g(\mathbf{x}_1)] \leqslant$$

$$\leqslant \theta\sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x}_2) + (1 - \theta)\sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x}_1) =$$

$$= \theta h(\mathbf{x}_2) + (1 - \theta)h(\mathbf{x}_1),$$

что и доказывает выпуклость функции $h(\mathbf{x})$.

Пример 2

Если область ограничений задана неравенствами $g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i$ при $i = 1, \ldots, m$, где $g_i(\mathbf{x})$ – выпуклые функции, то показать, что она выпукла.

Предположим, что x_1 и x_2 – допустимые точки внутри области ограничений. Тогда

$$g_i(\mathbf{x}_1) \leqslant b_i \quad \text{при} \quad i = 1, \ldots, m,$$

$$g_i(\mathbf{x}_2) \leqslant b_i \quad \text{при} \quad i = 1, \ldots, m.$$

Если $0 < \theta < 1$, то при $i = 1, 2, \ldots, m$

$$\begin{aligned} g_i[\theta \mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1] &\leqslant \theta g_i(\mathbf{x}_2) + (1-\theta) g_i(\mathbf{x}_1) \leqslant \\ &\leqslant \theta b_i + (1-\theta) b_i = \\ &= b_i. \end{aligned}$$

Следовательно, отрезок $\theta x_2 + (1-\theta) x_1$ принадлежит множеству допустимых точек, что справедливо для выпуклого множества.

Полученные выше результаты дают возможность доказать следующую теорему: если $f(x)$ – выпуклая функция на области ограничений, заданной неравенствами $g_i(x) \leqslant b_i$, где $g_i(x)$ – выпуклые функции, то локальный минимум функции $f(x)$ в этой области является и глобальным минимумом в этой же области.

Предположим, что в точке x^* достигается глобальный минимум, а ь точке x_0 достигается локальный минимум, причем $f(x^*) < f(x_0)$. Обе эти точки являются допустимыми, и поскольку допустимая область и функция $f(x)$ являются выпуклыми, то

$$\begin{aligned} f[\theta \mathbf{x}^* + (1-\theta)\mathbf{x}_0] &\leqslant \theta f(\mathbf{x}^*) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_0) \leqslant \\ &\leqslant \theta f(\mathbf{x}_0) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_0) \leqslant \\ &\leqslant f(\mathbf{x}_0) \end{aligned}$$

для $0 < \theta < 1$.

Но если θ достаточно мало, то отрезок $\theta x^* + (1-\theta) x_0$ лежит внутри δ-окрестности точки x_0. Тогда, поскольку в точке x_0 достигается локальный минимум, $f(x^*) \geqslant f(x_0)$. Следовательно, мы приходим к противоречию и x^* и x_0 должны совпадать.

Пример 3

Записать условия Куна–Такера для следующей задачи:

минимизировать функцию $f(x, y) = -x^2 - y^2$ при ограничениях $x, y \geqslant 0$, $x + 2y \leqslant 3$. Функция Лагранжа имеет вид

$$F(x, y, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}) = -x^2 - y^2 + \lambda_1(-x + u_1^2) + \lambda_2(-y + u_2^2) + \lambda_3(x + 2y + u_3^2 - 3).$$

Необходимые условия минимума выражаются уравнениями

$$\begin{aligned} &-2x - \lambda_1 + \lambda_3 = 0; \\ &-2y - \lambda_2 + 2\lambda_3 = 0; \\ &\lambda_1 x = 0, \ \lambda_2 y = 0, \ \lambda_3(x + 2y - 3) = 0; \\ &x + 2y \leqslant 3; \\ &\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \geqslant 0. \end{aligned}$$

Попытаемся найти решения этих уравнений.

а). Если $x > 0, y > 0$, то $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$.

б). Если $\lambda_3 = 0$, то $x = y = 0$ и функция достигает максимума.

в). Если $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, $\lambda_3 > 0$, то $2x = \lambda_3 = y$ и $x + 2y - 3 = 0$, следовательно, $x = 3/5$, $\lambda_3 = 6/5$, $y = 6/5$, все условия минимума выполняются и $f = -45/25$.

г). Если $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 > 0$, то $x = 0$, $y > 0$, $x + 2y = 3$, следовательно, $y = {}^3/_2$, $\lambda_3 = {}^3/_2$, $\lambda_1 = {}^3/_2$, все условия минимума выполняются и $f = -{}^9/_4$.

д). Если $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 > 0$, $\lambda_3 > 0$, то $x > 0$, $y = 0$, $x + 2y = 3$, следовательно, $x = 3$, $\lambda_3 = 6$, $\lambda_2 = 12$, все условия минимума выполняются и $f = -9$.

Значит, есть несколько точек, удовлетворяющих необходимым условиям. Глобальный минимум достигается в точке (3; 0) и равен – 9. Задача иллюстрируется рис. 5.6.

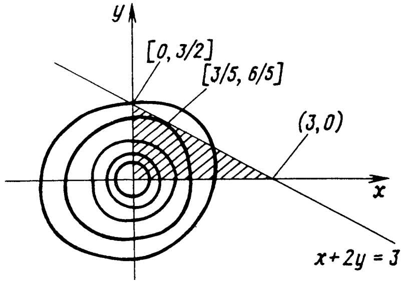

Рис. 5.6

Сложности, возникающие при решении примера 3, устраняются, если функция $f(\mathbf{x})$ и область ограничения выпуклы. Для задачи минимизации $f(\mathbf{x})$ при ограничениях $g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i$, где $f(\mathbf{x})$ и $g_i(\mathbf{x})$ – выпуклые функции, необходимые условия Куна–Такера (см. соотношение (5.23)) являются также и достаточными.

Для данного случая функция Лагранжа (см. соотношение (5.16))

$$F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i [g_i(\mathbf{x}) + u_i^2 - b_i]$$

есть сумма выпуклых функций, поэтому сама также выпукла, а множители $\lambda_i \geqslant 0$. Следовательно, функция F имеет глобальный минимум в точке, где ее производные исчезающе малы, и такая точка является единственной. Поэтому необходимые условия являются также и достаточными.

Пример 3 не противоречит данному результату. Функции $g_i(\mathbf{x})$ – выпуклые, но функция $f(x, y) = -(x^2 + y^2)$ *не выпукла*, а вогнута.

5.4. ЛИТЕРАТУРА

1 B. Bernholtz, 'A new derivation of the Kuhn–Tucker conditions', *Operations Research*, **12**, No. 2, 295–299, 1964.

2 H. W. Kuhn and A. W. Tucker, 'Non Linear Programming', in *Proc. of 2nd Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability* (Editor J. Neyman), Berkeley, University of California Press, 481–492, 1951.

3 G. R. Walsh, *Methods of Optimisation*, John Wiley, 1975.

4 D. J. Wilde, 'Differential Calculus in Non Linear Programming', *Operations Research* **10**, No. 6, 764–773, 1962.

5 P. Wolfe, 'Methods of Non Linear Programming' in *Recent Advances in Mathematical Programming* (Editors R. L. Graves and P. Wolfe), McGraw-Hill, New York, 67–86, 1963.

6 P. Wolfe, 'Methods of Non Linear Programming' in *Non Linear Programming* (Editor J. Abadie), Nato Summer School, Menton, 1964, North Holland Publishing Co., Amsterdam, 1967.

5.5. УПРАЖНЕНИЯ

1. Покажите, что функция $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$, где $x_1, x_2 = 4$ имеет минимум, равный 8 при $(x_1, x_2) = (\pm 2;\ \pm 2)$.
2. Покажите, что функция $f(x, y) = x^2 + y^2$ при ограничении $x - y = 5$ достигает минимума при $x = 2{,}5$, $y = -2{,}5$.

3. Если константы a, b, c, k – положительны, то найдите положительные x, y, z, такие, что функции $k = x + y + z$ и $w = ax^2 + by^2 + cz^2$ минимальны.
4. Если a, b, c – отрицательны и $f(x_1, x_2, x_3) = ax_2x_3 + bx_3x_1 + cx_1x_2$, где $x_1 + x_2 + x_3 = 1$, то покажите, что $f(x_1, x_2, x_3)$ имеет минимальное значение, равное $abc/[2(ab + bc + ca) - (a^2 + b^2 + c^2)]$ при условии положительности знаменателя.
5. Найдите стационарное значение (значения) функции $f(x, y, z) = xy^2z^3$ при ограничении $x + y + z = 6$.
6. Открытая коробка, изготовляемая из тонкого листа железа, имеет высоту z и прямоугольное основание с размерами x и y. Основание и стороны длиной x имеют толщину, равную d (малая величина), а стороны длиной y имеют толщину $2d$. Если количество материала фиксировано, покажите, что объем коробки максимален при $x = 2y = 4z$.
7. Найдите условия Куна–Такера и таким образом решите задачу

   минимизировать функцию $f(x, y) = x^2 + y^2$
   при ограничениях $x \geqslant 0$, $y \geqslant 0$, $x + y \geqslant 5$.
8. Найдите условия Куна–Такера и таким образом решите задачу

   минимизировать функцию $f(x, y) = x^2 + 6xy - 4x - 2y$
   при ограничениях $x^2 - 2y \leqslant 1$, $2x - 2y \leqslant 1$.
9. Если $f(\mathrm{x})$ – выпуклая функция на области X, то покажите, что $g(\mathrm{x}) = -af(\mathrm{x})$, где $a > 0$, – вогнутая функция на области X.
10. Функции $g_i(\mathrm{x})$ при $i = 1, 2, \ldots, m$ выпуклы. Покажите, что множество точек $\{\mathrm{x}: g_i(\mathrm{x}) \leqslant k\}$, где k – константа, выпукло.
11. Пусть $h(x)$ – положительная вогнутая функция и $a \leqslant x \leqslant b$. Покажите, что функция $g(x) = 1/h(x)$ выпуклая на отрезке $a \leqslant x \leqslant b$.
    Обобщите этот результат на случай, когда $h(\mathrm{x})$ – положительная вогнутая функция, определенная на множестве X. Покажите, что гессиан функции $g(\mathrm{x}) = 1/h(\mathrm{x})$ положительно определен.
12. Рассмотрите задачу минимизации выпуклой функции $f(\mathrm{x})$ при ограничениях $g_i(\mathrm{x}) \leqslant 0$, где $i = 1, 2, \ldots, m$. Предположите, что минимум $f(\mathrm{x})$ при отсутствии ограничений достигается в точке x^* и что $g_1(\mathrm{x}^*) > 0$, $g_2(\mathrm{x}^*) > 0$, $g_3(\mathrm{x}^*) > 0$. Если минимум при ограничениях достигается в точке x_0, покажите, что по крайней мере одно из значений функций $g_1(\mathrm{x}_0)$, $g_2(\mathrm{x}_0)$, $g_3(\mathrm{x}_0)$ равно нулю. Дайте геометрическую интерпретацию результата.
13. Найдите минимальное и максимальное значения функции

    $f(\mathrm{x}, \mathrm{y}) = \mathrm{x}^2 + \mathrm{y}^2$

    при ограничении $3x^2 + 4xy + 6y^2 = 140$. Дайте геометрическую интерпретацию результата.
14. Задача минимизации объема выпуска товара может быть сформулирована как задача минимизации функции

$$f(x_1, x_2) = \frac{\alpha}{x_1} + \frac{\beta}{x_2} + \gamma(x_1 + x_2),$$

    где x_1, $x_2 \geqslant 0$. Константы α и β связаны со стоимостями производства двух товаров, а γ – константа, связанная со стоимостью хранения товаров на складе (см. упр. 8 разд. 1.4).
    Покажите, что вышеприведенная функция минимальна, если $x_1 = \sqrt{\alpha/\gamma}$, $x_2 = \sqrt{\beta/\gamma}$.

В связи с тем что товары хранятся на складе, x_1 и x_2 должны удовлетворять, кроме того, условию $x_1 + x_2 \leqslant S$, где S – некоторая константа.

Напишите условие Куна–Такера для сформулированной задачи и таким образом получите решение.

15. Посылка, которую должны отправить по почте, имеет форму прямоугольника с размерами x_1, x_2, x_3. При отправлении посылки накладываются следующие ограничения: $x_1 \leqslant 20$, $x_2 \leqslant 11$, $x_3 \leqslant 42$ и $x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leqslant 72$. Найдите размеры, при которых объем будет максимальным. (Это модифицированная Розенброком задача о почтовой посылке. См. также следующую главу.)

16. Стандартная задача о почтовой посылке аналогична приведенной выше задаче, за исключением того, что ограничения имеют вид

    $x_i \leqslant 42$ при $i = 1, 2, 3$, $x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leqslant 72$.

    Напишите условия Куна–Такера для этой задачи и таким образом получите решение.

ГЛАВА 6. МЕТОДЫ ПОИСКА

6.1. МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ХУКА–ДЖИВСА

В первую очередь рассмотрим методы решения задач нелинейного программирования, в которых используются только значения функции. С этой целью успешно применяются методы прямого поиска, изложенные в гл. 3, где они были использованы для решения задач оптимизации без ограничений. Эти методы нетрудно модифицировать и для учета ограничений. Было выдвинуто предположение, что для этого будет вполне достаточно при решении задачи минимизации присвоить целевой функции очень большое значение там, где ограничения нарушаются. К тому же такую идею просто реализовать с помощью программирования.

Нужно проверить, каждая ли точка, полученная в процессе поиска, принадлежит области ограничений. Если каждая, то целевая функция вычисляется обычным путем. Если нет, то целевой функции присваивается очень большое значение. Таким образом, поиск будет осуществляться снова в допустимой области в направлении к минимальной точке внутри этой области.

В тексте программы модифицированного метода прямого поиска Хука–Дживса сделана попытка реализовать такую процедуру. Рассматриваемая задача формулируется следующим образом:

минимизировать $f(x_1, x_2) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$
при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$, $x_1 + x_2 \geqslant 4$

(см. пример 1 из разд. 5.2).

Программа аналогична приведенной в разд. 3.2 программе Хука–Дживса, за исключением того, что подпрограмма, начинающаяся со строки 2000, была изменена с целью учета ограничений так, как об этом говорилось выше. Минимум, равный 44, достигается в точке (3; 1) при ограничении $x_1 + x_2 = 4$.

```
10 PRINT "МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЙ"
20 REM ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 2000
30 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
40 DIM X(N),B(N),Y(N),P(N)
```

```
50 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XN"
60 FOR I=1 TO N:INPUT X(I):NEXT I
70 PRINT "ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА":INPUT H
80 K=H:FE=0
90 FOR I=1 TO N
100 Y(I)=X(I):P(I)=X(I):B(I)=X(I):NEXT I
110 GOSUB 2000:FI=Z
120 PRINT "НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ"Z
130 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"  ";:NEXT I:PRINT ""
140 PS=0:BS=1
150 REM ИССЛЕДОВАНИЕ ВОКРУГ БАЗИСНОЙ ТОЧКИ
180 J=1:FB=FI
200 X(J)=Y(J)+K
210 GOSUB 2000
220 IF Z<FI THEN GOTO 280
230 X(J)=Y(J)-K
240 GOSUB 2000
250 IF Z<FI THEN GOTO 280
260 X(J)=Y(J)
270 GOTO 290
280 Y(J)=X(J)
290 GOSUB 2000
300 FI=Z
310 PRINT "ПРОБНЫЙ ШАГ"Z
320 FOR I=1 TO N:PRINT X(I);"  ";:NEXT I:PRINT ""
330 IF J=N THEN GOTO 360
340 J=J+1
350 GOTO 200
```

Для начальной точки (4; 3) и при длине шага, равной единице, программой успешно решена задача минимизации. Ниже приведена распечатка результата работы программы.

```
МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЙ
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 2
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XN
 4
 3
ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА
 1
НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ 141
 4    3
ПРОБНЫЙ ШАГ 108
 3    3
ПРОБНЫЙ ШАГ 71
 3    2
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1E+30
 2     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3    1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3    1
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1E+30
 3     0
ПРОБНЫЙ ШАГ 48
 4    0
ПРОБНЫЙ ШАГ 48
 4    0
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3    1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3    1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
```

```
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
ПРОБНЫЙ ШАГ 44
 3     1
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
       МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = 3
X 2 = 1

МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  44
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  68
```

Для начальной точки (3; 4) и длины шага, равной единице, программой также успешно решена задача минимизации.

Для начальной точки (5; 6) и длины шага, равной единице, задача не решена, так как программа остановилась в точке (1; 3), т. е. на активном ограничении, и выдала неверный результат. Распечатка результата работы программы приведена ниже.

```
МЕТОД ХУКА-ДЖИВСА ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЯ
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 2
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XN
 5
 6
ВВЕДИТЕ ДЛИНУ ШАГА
 1
НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ 375
 5     6
ПРОБНЫЙ ШАГ 324
 4     6
ПРОБНЫЙ ШАГ 253
 4     5
```

```
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 155
 3      4
ПРОБНЫЙ ШАГ 124
 2      4
ПРОБНЫЙ ШАГ 81
 2      3
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1E+30
 0       1
ПРОБНЫЙ ШАГ 1E+30
 0      1
ПРОБНЫЙ ШАГ 1E+30
 0      1
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 81
 2       3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1E+30
 0       3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 60
 1       3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 1      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999     3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999     3
ПОИСК ПО ОБРАЗЦУ 1E+30
```

```
 .9999998      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999      3
ЗАМЕНА БАЗИСНОЙ ТОЧКИ 60
 .9999999      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999      3
ПРОБНЫЙ ШАГ 60
 .9999999      3
УМЕНЬШИТЕ ДЛИНУ ШАГА
      МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = .9999999
X 2 = 3

МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  60
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  96
```

Аналогичные неутешительные результаты были получены для начальной точки (5; 6) и длины шага, равной 0,5. Неверное решение было найдено в точке (1,5; 2,5). Для начальной точки (4; 3) и длины шага, равной 0,5, программа работала нормально, но было получено неверное решение в точке (2,5; 1,5).

Проблема понятна. С помощью данного метода невозможно двигаться вдоль границы области ограничений и сходимость достигается в первой же точке границы, где и находится решение. Как подчеркивалось в гл. 5, общая задача оптимизации при наличии ограничений очень сложна и для получения практического метода решения требуются более изощренные процедуры, чем приведенная выше.

6.2. КОМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД

Трудности, встречающиеся при попытке использовать существовавшие ранее методы поиска, подтолкнули Бокса в 1964 году к созданию своего метода. По существу, он является модификацией симплексного метода Нелдера—Мида, однако позволяет учитывать ограничения. Бокс назвал его комплексным методом.

Решаемая задача состоит в минимизации функции $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$, где $\mathbf{x}$ определяется *явными* ограничениями

$$l_j \leqslant x_j \leqslant u_j \quad \text{при } j = 1, 2, \ldots, n, \tag{6.1}$$

а также *неявными* ограничениями

$$g_i(\mathbf{x}) \leqslant b_i \quad \text{при } i = 1, 2, \ldots, m. \tag{6.2}$$

Если целевая функция $f(\mathbf{x})$ выпукла и функции $g_i(\mathbf{x})$ тоже выпуклы, то задача будет иметь единственное решение. Значения l_j и u_j являются нижней и верхней границами переменных. Если в конкретной задаче заданные переменные теоретически не имеют ограничений, то предположение о наличии у них "безопасных" границ, т. е. границ, включающих оптимум, позволит применить комплексный метод.

Данный метод является итерационным. В нем предполагается, что известны значения n и m, l_j и u_j и начальная точка $\mathbf{x}_1$, удовлетворяющая всем ограничениям (см. неравенства (6.1) и (6.2)). В первую очередь необходимо выбрать k точек, которые удовлетворяют ограничениям, а также вычислить целевую функцию во всех k точках. Множество этих точек называется *комплексом*. Бокс обнаружил, что k должно быть больше $(n + 1)$ – числа точек, используемых в симплексном методе Нелдера–Мида и положил $k = 2n$.

Как упоминалось выше, предполагается, что точка $\mathbf{x}_1$, удовлетворяющая всем ограничениям, задана. Остальные точки, удовлетворяющие неравенству (6.1), могут быть выбраны следующим образом:

$$x_{ij} = l_j + r(u_j - l_j) \tag{6.3}$$

для $j = 1, 2, \ldots, n$ и $i = 2, 3, \ldots, k$, где r – псевдослучайная равномерно распределенная переменная в интервале (0; 1). Такая переменная в языке Бейсик может быть задана с помощью оператора Y-RND(X).

Точки, выбираемые в соответствии с уравнением (6.3) для данного j, будут автоматически удовлетворять неравенству (6.1). Если эти точки удовлетворяют также неравенству (6.2), то они принимаются в качестве начальных точек комплекса. Если точка, выбранная в соответствии с уравнением (6.3), не удовлетворяет неравенству (6.2), то она смещается на половину расстояния до центра тяжести множества уже принятых точек, т. е. формируется точка

$$\mathbf{x}_i' = \frac{(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_c)}{2}, \tag{6.4}$$

где

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{i-1} \sum_{e=1}^{i-1} \mathbf{x}_e \tag{6.5}$$

Если точка в соотношении (6.4) все еще не является допустимой, то описанная соотношением (6.3) процедура повторяется вновь до тех пор, пока точка не станет допустимой. Если функция $g_i(\mathbf{x})$ выпукла, то в конце концов ограничения будут выполняться. Конечно, поскольку точка $\mathbf{x}_1$ находится внутри области ограничений, то комплекс будет состоять из допустимых точек.

Удобно упорядочить точки комплекса в соответствии со значениями функции. Процедуру инициализации комплекса можно описать с помощью блок-схемы (рис. 6.1). Она реализуется в программе операторами в строках с номерами до 1000.

Теперь мы подошли к итерационной процедуре комплексного метода, в которой производится поиск минимума перемещением по направлению к минимуму внутри области ограничений. Для этой процедуры необходимы следующие шаги:

1. Найти точку с наибольшим значением функции $\mathbf{x}_h$ и найти центр $\mathbf{x}_0$ остальных $(k - 1)$ точек.

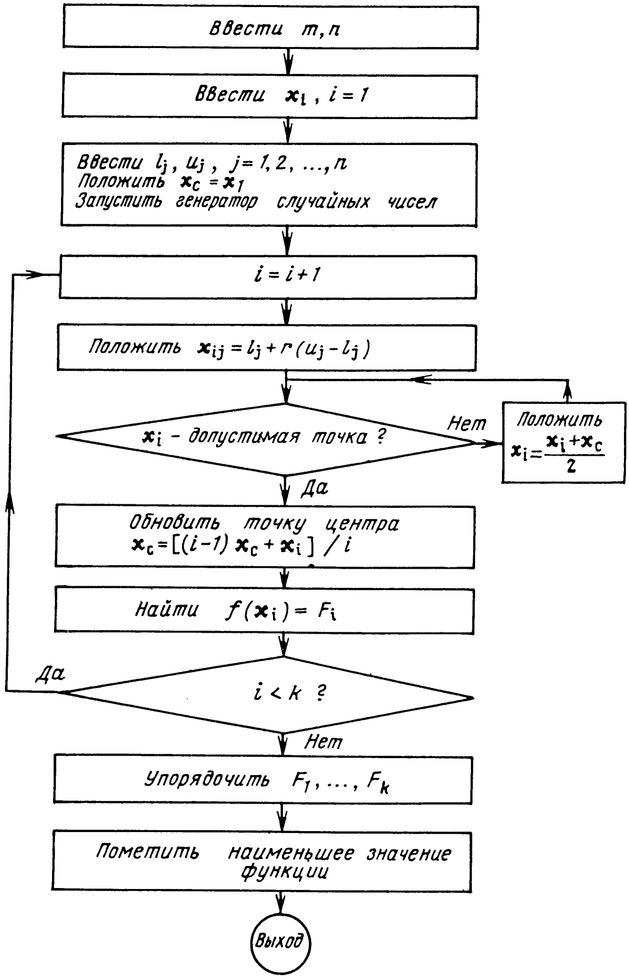

Рис. 6.1

2. Попытаемся сместиться от точки x_h и получить при этом точку x_r отражением точки x_h относительно точки x_0, используя коэффициент отражения $\alpha > 1$, что можно записать как

$$x_r = (1 + \alpha)x_0 - \alpha x_h \,. \qquad (6.6)$$

3. Проверить, является ли точка x_r допустимой.

а). Если точка x_r не является допустимой и не выполняется ограничение для l_j, то полагаем $x_{rj} = l_j + 10^{-6}$; если не выполняется ограничение для u_j, то полагаем $x_{rj} = u_j - 10^{-6}$

б). Если не выполняются ограничения, то точку $\mathbf{x}_r$ перемещают на половину расстояния между $\mathbf{x}_r$ и центром $\mathbf{x}_0$, т. е.

$$\mathbf{x}_r \text{ (новое)} = (\mathbf{x}_r + \mathbf{x}_0)/2. \tag{6.7}$$

Затем производится повторная проверка на допустимость и шаг 3 повторяется до тех пор, пока не будет получена допустимая точка.

4. Если точка $\mathbf{x}_r$ является допустимой, то вычисляется значение функции $f(\mathbf{x}_r)$ и сравнивается с $f(\mathbf{x}_k)$ – наибольшим значением функции.

Если $f(\mathbf{x}_r) > f(\mathbf{x}_k)$, т. е. "хуже", чем наибольшее значение, полученное ранее, то точка $\mathbf{x}_r$ смещается к центру $\mathbf{x}_0$ на половину расстояния между ними, т. е.

$$\mathbf{x}_r \text{ (новое)} = (\mathbf{x}_r + \mathbf{x}_0)/2$$

и процесс возвращается на шаг 3.

5. Если $f(\mathbf{x}_r) < f(\mathbf{x}_k)$, то точка $\mathbf{x}$ заменяется на точку $\mathbf{x}_r$, затем точки и значения функции комплекса снова упорядочиваются.

6. Вычисляются две величины, использующиеся при проверке сходимости метода: среднее квадратическое отклонение σ для k значений функции и максимальное расстояние d_m между двумя точками комплекса. Первая величина вычисляется как

$$\sigma = \left\{ \sum_{e=1}^{k} [f(\mathbf{x}_e) - \bar{f}]^2/k \right\}^{1/2}, \tag{6.8}$$

где

$$\bar{f} = \frac{1}{k} \sum_{e=1}^{k} f(\mathbf{x}_e), \tag{6.9}$$

но для вычисления σ^2 лучше использовать формулу

$$\sigma^2 = \left\{ \sum_{e=1}^{k} f(\mathbf{x}_e)^2 - \frac{[\sum f(\mathbf{x})]^2}{k} \right\} \Big/ k. \tag{6.10}$$

7. Величины σ^2 и d_m проверяются на сходимость. Если обе эти величины достаточно малы, то процедура поиска минимума заканчивается. В противном случае необходимо вернуться на шаг 1 и повторить процедуру.

В тексте программы промежуточные результаты печатаются в строке 3500, но только в том случае, если наименьшее значение функции было улучшено.

На блок-схеме (рис. 6.2) приведены шаги 1 – 7, которые реализованы в программе до оператора в строке 3800. Когда сходимость достигнута, с помощью операторов в строках 4000–4100 находится решение.

Целевая функция вычисляется в подпрограмме, начинающейся с оператора 5000. Ограничения проверяются в подпрограмме, начинающейся с оператора 6000. Переменная IC = 1 указывает на то, что были нарушены неявные ограничения, а переменная EC = 1 – на то, что были нарушены явные ограничения. Массивы EC (J), J = 1, 2, . . . , 2N, и IC (L), L = 1, . . . , M, указывают на конкретные ограничения, которые были нарушены.

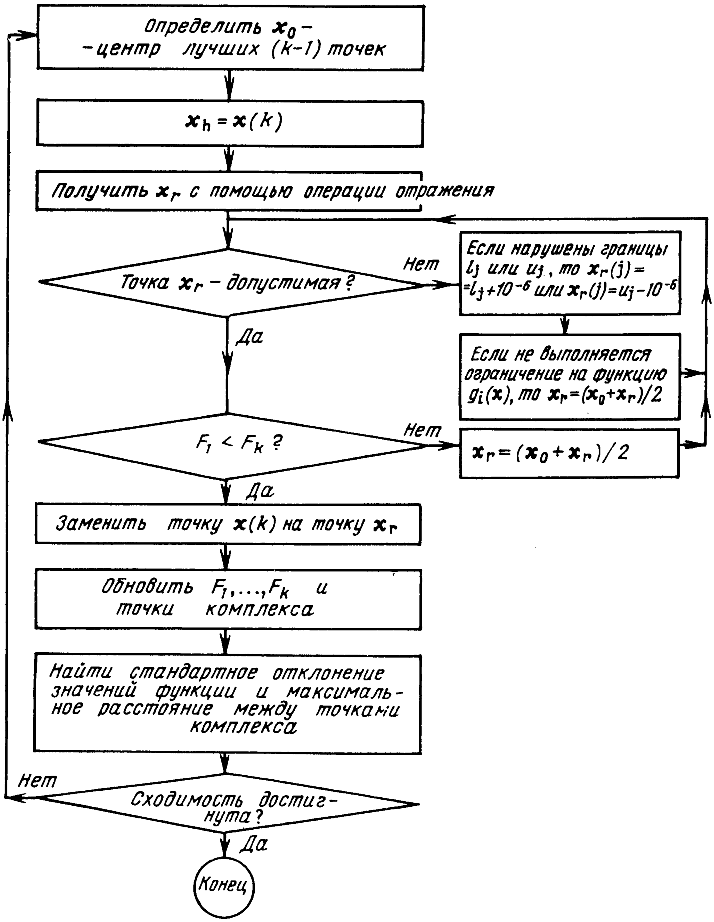

Рис. 6.2

Данные подпрограммы подходят для решения модифицированной задачи о почтовых посылках (см. упр. 15 разд. 5.5)

минимизировать функцию $f(\mathrm{x}) = -x_1 x_2 x_3$
при ограничениях $0 \leqslant x_1 \leqslant 20$, $0 \leqslant x_2 \leqslant 11$, $0 \leqslant x_3 \leqslant 42$ и $x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leqslant 72$.

В этой задаче есть только одно неявное ограничение, однако необходимо выяснить, как следует модифицировать подпрограмму для других ограничений. Заметим, что если IM = 1 при входе в подпрограмму, то проверяются только неявные ограничения. В этом смысл оператора в строке 640.

Процедура сходится, когда комплекс "стягивается" до такого размера, при котором он помещается в небольшой окрестности точки минимума. Проверка сходимости будет успешно заканчиваться на этом шаге, поскольку разница в значениях функции будет также мала.

Выбор $k = 2n$ и $\alpha = 1{,}3$ (см. строку 1120) является эмпирическим правилом, предложенным Боксом. Первое значение частично предотвращает преждевременное сжатие комплекса. Коэффициент отражения $\alpha > 1$ позволяет комплексу расширяться и перемещаться в нужном направлении. Перемещения на половину расстояния от начальной точки к центру сжимают комплекс. Поэтому комплекс может перемещаться внутри допустимой области вдоль границ и огибать углы в местах пересечения ограничений.

Способ выбора начального комплекса означает, что легко может быть сделано несколько перемещений. Очевидно, что будет сделано более одного перемещения даже в том случае, когда метод преждевременно сходится по причине какой-нибудь особенности используемых точек. Конечно, разумно получить некоторую информацию о значении минимума функции, а затем включить эту информацию в подпрограмму, начинающуюся со строки 5000, чтобы для реально минимизируемой функции минимум был бы близок к нулю. Это позволит избежать любых осложнений в процессе вычисления погрешности при проверке на сходимость. Если из девяти цифр значения функции восемь первых цифр совпадают, то можно столкнуться с большими сложностями при определении точности и даже получить отрицательную разность при определении погрешности (это как раз будет машинная точность, но все равно в процессе вычисления появятся погрешности). Эти сложности были учтены в подпрограмме, начинающейся со строки 5000. Итак, установлено, что минимум функции действительно равен нулю.

Пример 1*

Решить модифицированную задачу о почтовой посылке. В качестве начальной точки взять точку (20; 10; 10). Датчик случайных чисел бы инициализирован значением 7199, однако это не так важно. Приведена первая и последняя части распечатки программы. Истинный минимум достигается в точке (20; 11; 15), так что этим методом получена хорошая точность. Число вычислений функции равно 231, что довольно много (по сравнению со многими другими запусками), однако вполне согласуется с результатами, полученными Боксом.

```
20 PRINT "КОМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД":PRINT ""
40 REM ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000
60 REM ВЫЧИСЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ G1,G2,...,GM И ПРОВЕРКА
65 REM ОГРАНИЧЕНИЙ ПРОИЗВОДИТСЯ В СТРОКЕ 6000
80 PRINT "ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВО ОГРАНИЧЕНИЙ":INPUT M
100 PRINT "ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
120 DIM X(N),Y(N),L(N),U(N),XC(N),XO(N),XR(N),XH(N)
160 K=2*N:PP=0
180 DIM C(K,N),F(K),G(M),IC(M),EC(2*N)
200 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ"
220 FOR J=1 TO N:INPUT X(J):C(1,J)=X(J):XC(J)=X(J):NEXT J
240 REM ПРОЧИТАТЬ ЗНАЧЕНИЯ НИЖНИХ И ВЕРХНИХ ГРАНИЦ
260 FOR J=1 TO N:READ L(J),U(J):NEXT J
280 REM ВКЛЮЧИТЬ ГЕНЕРАТОР СЛУЧАЙНЫХ ЧИСЕЛ
290 PRINT "ВВЕДИТЕ X":INPUT X
```

* В этом примере приведены результаты, полученные автором, и результаты, полученные на IBM PC XT (см. предисловие редактора перевода). – *Прим. ред.*

```
500 I=1
520 GOSUB 5000:F(1)=Z
600 I=I+1
620 FOR J=1 TO N:C(I,J)=L(J)+RND(X)*(U(J)-L(J)):X(J)=C(I,J):NEXT J
640 IM=1:GOSUB 6000
660 IF IC=1 THEN GOTO 720
670 REM ОБНОВИТЬ ЗНАЧЕНИЕ "ЦЕНТРА ТЯЖЕСТИ"
680 FOR J=1 TO N:XC(J)=((I-1)*XC(J)+C(I,J))/I:NEXT J
700 GOTO 760
720 FOR J=1 TO N:C(I,J)=(C(I,J)+XC(J))/2:X(J)=C(I,J):NEXT J
740 GOTO 640
760 GOSUB 5000:F(I)=Z
780 IF I<K THEN GOTO 600
790 REM УПОРЯДОЧИТЬ ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ И ТОЧКИ,
795 REM В КОТОРЫХ ОНА ВЫЧИСЛЕНА
800 FOR J=1 TO K-1
820 FOR I=J+1 TO K
840 IF F(J)<=F(I) THEN GOTO 900
860 F=F(J):F(J)=F(I):F(I)=F
880 FOR L=1 TO N:Y(L)=C(J,L):C(J,L)=C(I,L):C(I,L)=Y(L):NEXT L
900 NEXT I:NEXT J
910 REM ЗАПОМНИТЬ НАИМЕНЬШЕЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ
920 FM=F(1)
1000 PRINT "ПЕРВАЯ ТОЧКА"
1020 PRINT "МИНИМАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ="F(1)
1040 PRINT "МИНИМАЛЬНАЯ ТОЧКА"
1060 FOR L=1 TO N:PRINT "X";L,C(1,L):NEXT L
1080 PRINT ""
1100 REM ЗАДАТЬ КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ
1120 A=1.3
1190 REM ОПРЕДЕЛИТЬ "ЦЕНТР ТЯЖЕСТИ" НАИЛУЧШИХ (K-1) ТОЧЕК
1195 REM И ЗАПОМНИТЬ НАИХУДШУЮ ТОЧКУ
1200 FOR L=1 TO N:XH(L)=C(K,L):XO(L)=(K*XC(L)-XH(L))/(K-1):NEXT L
1390 REM ПОЛУЧИТЬ ОТРАЖЕННУЮ ТОЧКУ
1400 FOR L=1 TO N:XR(L)=(1+A)*XO(L)-A*XH(L):X(L)=XR(L):NEXT L
1490 REM ПРОВЕРИТЬ, ДОПУСТИМА ЛИ НОВАЯ ТОЧКА
1500 IM=0
1520 GOSUB 6000
1540 IF EC=0 AND IC=0 THEN GOTO 2000
1550 REM ЕСЛИ ТОЧКА ЯВЛЯЕТСЯ ДОПУСТИМОЙ, ТО ПЕРЕЙТИ К СТРОКЕ 2000
1555 REM И ВЫЧИСЛИТЬ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ
1600 IF EC=0 THEN GOTO 1800
1610 REM ЕСЛИ ЯВНЫЕ ОГРАНИЧЕНИЯ НАРУШЕНЫ, ТО
1615 REM ПОМЕСТИТЬ ТОЧКУ ВНУТРЬ ГРАНИЦ
1620 FOR J=1 TO N
1640 IF EC(J)=1 THEN XR(J)=L(J)+.00001:X(J)=XR(J)
1660 IF EC(J+N)=1 THEN XR(J)=U(J)-.00001:X(J)=XR(J)
1680 NEXT J
1800 IF IC=0 THEN GOTO 2000
1810 REM ЕСЛИ НЕЯВНЫЕ ОГРАНИЧЕНИЯ НАРУШЕНЫ, ТО
1815 REM ПЕРЕМЕСТИТЬСЯ НА ПОЛОВИНУ РАССТОЯНИЯ К "ЦЕНТРУ ТЯЖЕСТИ"
1820 FOR L=1 TO N:XR(L)=(XR(L)+XO(L))/2:X(L)=XR(L):NEXT L
1840 GOTO 1490
2000 GOSUB 5000:FR=Z
2010 REM ЕСЛИ НОВОЕ ЗНАЧЕНИЕ - НАИХУДШЕЕ,
2015 REM ТО ПЕРЕМЕСТИТЬСЯ НА ПОЛОВИНУ РАССТОЯНИЯ К ТОЧКЕ XO
2018 REM И ВЫЧИСЛИТЬ НОВОЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ
2020 IF FR<F(K) THEN GOTO 2400
2040 FOR L=1 TO N:XR(L)=(XR(L)+XO(L))/2:X(L)=XR(L):NEXT L
2060 GOTO 1490
2400 REM ОБНОВИТЬ XC И ЗАМЕНИТЬ НАИХУДШУЮ ТОЧКУ НОВОЙ ТОЧКОЙ
2410 F(K)=FR
2420 FOR L=1 TO N
2440 XC(L)=K*XC(L)-C(K,L)+XR(L)
2460 XC(L)=XC(L)/K:C(K,L)=XR(L)
2480 NEXT L
```

```
2490 REM УПОРЯДОЧИТЬ ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ И ТОЧКИ,
2495 REM В КОТОРЫХ ОНА ВЫЧИСЛЕНА
2500 FOR J=1 TO K-1
2520 FOR I=J+1 TO K
2540 IF F(J)<=F(I) THEN GOTO 2600
2560 F=F(J):F(J)=F(I):F(I)=F
2580 FOR L=1 TO N:Y(L)=C(J,L):C(J,L)=C(I,L):C(I,L)=Y(L):NEXT L
2600 NEXT I:NEXT J
2610 REM ЕСЛИ НАИМЕНЬШЕЕ ЗНАЧЕНИЕ ФУНКЦИИ УМЕНЬШЕНО,
2615 REM ВЫСТАВИТЬ ПРИЗНАК ПЕЧАТИ
2620 IF F(1)<FM THEN PP=1
2630 REM ЕСЛИ УМЕНЬШЕНИЕ ФУНКЦИИ НЕ ОБНАРУЖЕНО,
2635 REM ТО ПРОВЕРКА КРИТЕРИЯ ЗАВЕРШЕНИЯ ПОИСКА МИНИМУА НЕ ПРОИЗВОДИТ
2640 IF PP=0 THEN GOTO 1190
2990 REM НАЙТИ ОТКЛОНЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИИ
3000 S1=0:S2=0
3020 FOR I=1 TO K:S1=S1+F(I):S2=S2+F(I)*F(I):NEXT I
3040 SD=S2-S1*S1/K:SD=SD/K
3090 REM НАЙТИ МАКСИМАЛЬНОЕ РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ
3095 REM ТОЧКАМИ КОМПЛЕКСА
3100 DM=0
3120 FOR I=1 TO K-1:FOR J=I+1 TO K
3140 D=0
3160 FOR L=1 TO N:D=D+(C(I,L)-C(J,L))^2:NEXT L
3180 D=SQR(D)
3200 IF D>DM THEN DM=0
3220 NEXT J:NEXT I
3400 IF PP=0 THEN GOTO 3790
3500 PRINT "НОВАЯ ТОЧКА В СТРОКЕ 3500"
3520 PRINT "МИНИМАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ="F(1)
3540 PRINT "ТОЧКА МИНИМУМА"
3560 FOR L=1 TO N:PRINT "X";L,C(1,L):NEXT L
3580 PRINT ""
3600 FM=F(1):PP=0
3790 REM ПРОВЕРКА СХОДИМОСТИ
3800 IF SD>.000001 AND DM>.0001 THEN GOTO 1190
4000 PRINT "МИНИМУМ НАЙДЕН"
4020 PRINT "ТОЧКА МИНИМУМА"
4040 FOR L=1 TO N:PRINT "X"L,C(1,L):NEXT L
4060 PRINT "МИНИМУМ ФУНКЦИИ="F(1)
4080 PRINT "КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ="FE
4100 END
5000 Z=-X(1)*X(2)*X(3)+3300
5050 FE=FE+1
5100 RETURN
6000 FOR II=1 TO 2*N:EC(II)=0:NEXT II:EC=0
6020 FOR II=1 TO M:IC(II)=0:NEXT II:IC=0
6050 IF IM=1 THEN GOTO 7100
6090 REM ПРЕДЫДУЩАЯ СТРОКА ПРЕДНАЗНАЧЕНА ДЛЯ ПРОВЕРКИ
6095 REM НЕРАВЕНСТВА GI(X)<=BI
6100 FOR II=1 TO N
6120 IF X(II)<L(II) THEN EC(II)=1:EC=1
6140 IF X(II)>U(II) THEN EC(N+II)=1:EC=1
6160 NEXT II
7100 G(1)=X(1)+2*X(2)+2*X(3)
7110 IF G(1)>72 THEN IC(1)=1:IC=1
8000 RETURN
9000 DATA 0,20,0,11,0,42
```

```
КОМПЛЕКСНЫЙ МЕТОД

ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВО ОГРАНИЧЕНИЙ
 1
ВВЕДИТЕ КОЛИЧЕСТВО ПЕРЕМЕННЫХ
 3
```

```
COMPLEX METHOD

NO. OF CONSTRAINTS    1
NO. OF VARIABLES      3
INITIAL VALUE         20,10,10
INPUT X               7199
```

```
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ
 20
 10
 10
ВВЕДИТЕ X
-71
ПЕРВАЯ ТОЧКА
МИНИМАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ= 243.2185
МИНИМАЛЬНАЯ ТОЧКА
X 1              19.03517
X 2               9.735619
X 3              16.49469

НОВАЯ ТОЧКА В СТРОКЕ 3500
МИНИМАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ РАВНО  238.7466
ТОЧКА МИНИМУМА
X 1              19.0307
X 2               9.734394
X 3              16.52478

МИНИМУМ НАЙДЕН
ТОЧКА МИНИМУМА
X 1              19.0307
X 2               9.734394
X 3              16.52478
МИНИМУМ ФУНКЦИИ РАВЕН  238.7466
КОЛИЧЕСТВО ВЫЧИСЛЕНИЙ ФУНКЦИИ РАВНО  7
```

```
FIRST POINT
MIN. VALUE = 180.908875
MIN. POINT
X 1              19.2130268
X 2               9.87028714
X 3              16.4475982

NEW POINT AT 3500
MIN. VALUE = 159.33961
MIN. POINT
X 1              19.3693315
X 2              10.0923334
X 3              16.0662587

NEW POINT AT 3500
MIN. VALUE = 8.96072388E-03
MIN. POINT
X 1              19.9999048
X 2              10.9999616
X 3              15.0000083

MINIMUM FOUND
MINIMUM POINT
X 1              19.9999048
X 2              10.9999616
X 3              15.0000083
FUNCTION MINIMUM= 8.96072388E-03
FUNCTION EVALUATIONS=231
```

Комплексный метод применим к широкому кругу задач с ограничениями. Его, конечно, не следует рассматривать в качестве панацеи в этой области. Если целевая функция выпукла и, кроме того, выпукла область ограничений, то применение метода будет успешным, хотя определенные особенности задачи могут потребовать некоторой модификации критерия завершения. Если целевая функция вогнута или область ограничений не выпукла, нетрудно видеть, как поиск этим методом может закончиться неудачей. Действительно, в случае, если область ограничений не выпукла, не очевидно, что центр допустимых точек будет допустимой точкой. Таким образом, перемещение

$$\mathbf{x}_r \text{ (новое)} = (\mathbf{x}_r + \mathbf{x}_0)/2$$

не гарантирует получения нужного результата.

Необходимо также обратить внимание на проверку того, что найден был не локальный, а глобальный минимум. Бокс полагает, что, произведя более одного запуска программы при различных начальных точках, можно решить эту проблему с помощью вышеописанного метода. Случайный характер формирования начального комплекса означает, что первоначально формируется хорошее покрытие области ограничений и поэтому существует тенденция сходимости к глобальному минимуму. Сходимость к одному и тому же значению при нескольких запусках программы подтверждает это.

6.3. ЛИТЕРАТУРА

M. J. Box, 'A new method of constrained optimisation and a comparison with other methods', *The Comp. Journal*, **8**, 42–52, 1965.

1. Используйте комплексный метод для минимизации функции $f(x, y) = x^2 + y^2$ при ограничениях $x \geqslant 0, y \geqslant 0, x + y \geqslant 5$.
2. Минимизируйте функцию $f(x, y) = x^2 + 6xy - 4x - 2y$ при ограничениях $x^2 + 2y \leqslant 1$, $2x - 2y \leqslant 1$.
3. Минимизируйте функцию $f(x, y) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$ при ограничениях $x_1 > 0$, $x_2 \geqslant 0$ и $x_1 + x_2 \geqslant 4$.
4. Проэкспериментируйте с программой, реализующей комплексный метод, заменив k – число точек в комплексе (строка 160); α – коэффициент отражения (строка 1120). Решите задачи, приведенные ниже и рассмотренные в тексте данной главы, с новыми значениями.
5. Решите задачу минимизации функции

$$f(x_1, x_2) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} + (x_1 + x_2)$$

при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$, $x_1 + x_2 \leqslant S$. Рассмотрите два случая: $S = 6$; $S = 4$ (см. упр. 14 разд. 5.5).

6. Минимизируйте функцию $f(\mathbf{x}) = -[9 - (x_1 - 3)^2]x_2^3/27\sqrt{3}$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $0 \leqslant x_2 \leqslant x_1/\sqrt{3}$, $0 \leqslant x_1 + \sqrt{3}x_2 \leqslant 6$.
7. Минимизируйте функцию $f(\mathbf{x}) = x_1^4 + x_2^2$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_1x_2 \geqslant 8$.
8. Минимизируйте функцию $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ при ограничениях $x_1 + x_2 + x_3 \geqslant 3$, $x_1x_2x_3 \geqslant 3$. (В качестве начальной точки возьмите точку (1; 2; 3).)
9. Минимизируйте функцию $f(x_1, x_2) = (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 4)$ при ограничениях $2x_1^2 + x_2^2 \leqslant 34$, $2x_1 + 3x_2 \leqslant 18$, $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$.
10. Минимизируйте функцию $f(x_1, x_2, x_3) = -x_1x_2x_3$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$, $x_3 \geqslant 0$, $2x_1^2 + x_2^2 + 3x_3^2 \leqslant 51$.

ГЛАВА 7. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ БЕЗ ОГРАНИЧЕНИЙ

7.1. ШТРАФНЫЕ ФУНКЦИИ

Основная идея метода штрафной функции состоит в преобразовании задачи минимизации функции

$$z = f(\mathbf{x})$$

с соответствующими ограничениями, наложенными на $\mathbf{x}$, в задачу поиска минимума *без ограничений* функции

$$Z = f(\mathbf{x}) + P(\mathbf{x}).$$

Функция $P(\mathbf{x})$ является штрафной. Необходимо, чтобы при нарушении ограничений она "штрафовала" функцию Z, т. е. увеличивала ее значение. В этом случае минимум Z будет находиться внутри области ограничений. Функция $P(\mathbf{x})$, удовлетворяющая этому условию, может быть не единственной.

Задачу минимизации можно сформулировать следующим образом:

минимизировать функцию $z = f(\mathbf{x})$ (7.1)

при ограничениях $c_j(\mathbf{x}) > 0$, $j = 1, 2, \ldots, m$. (7.2)

Замечание. Ограничение вида "меньше или равно", $h(\mathbf{x}) \leqslant 0$, всегда может быть записано как $-h(\mathbf{x}) \geqslant 0$, поэтому в приведенной выше формулировке нет потери общности.

Функцию $P(\mathbf{x})$ удобно записать следующим образом:

$$P(\mathbf{x}) = r \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x})}. \tag{7.3}$$

где r – *положительная* величина. Тогда функция $Z = \varphi(\mathbf{x}, r)$ принимает вид

$$Z = \varphi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + r \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x})} \cdot \tag{7.4}$$

Если $\mathbf{x}$ принимает допустимые значения, т. е. значения, для которых $c_j(\mathbf{x}) \geqslant 0$, то Z принимает значения, которые больше соответствующих значений $f(\mathbf{x})$ (истинной целевой функции данной задачи), и разность можно уменьшить за счет того, что r может быть очень малой величиной. Но если $\mathbf{x}$ принимает значения, которые хотя и являются допустимыми, но близки к границе области ограничений, и по крайней мере одна из функций $c_j(\mathbf{x})$ близка к нулю, тогда значения функции $P(\mathbf{x})$ и, следовательно, значения функции Z станут очень велики. Таким образом, влияние функции $P(\mathbf{x})$ состоит в создании "гребня с крутыми краями" вдоль каждой границы области ограничений. Следовательно, если поиск начинается из допустимой точки и осуществляется поиск минимума функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$ без ограничений, то минимум, конечно, будет достигаться внутри допустимой области для задачи с ограничениями. Полагая r достаточно малой величиной, для того чтобы влияние $P(\mathbf{x})$ было малым в точке минимума, мы можем сделать точку минимума функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$ *без ограничений* совпадающей с точкой минимума функции $f(\mathbf{x})$ *с ограничениями.*

Рассмотрим очень простой пример, который позволит понять, "что, собственно, происходит".

Пример 1

Используя штрафную функцию, заданную уравнением (7.4), минимизировать функцию $f(x) = x$ при ограничениях $x \geqslant 2$, т. е. $x - 2 \geqslant 0$. Минимальным значением функции является 2 при $x = 2$. Как с помощью штрафной функции можно найти решение? Рассмотрим функцию

$$\varphi(x, r) = x + \frac{r}{x-2}.$$

На рис. 7.1 изображен график функции $\varphi(x, r)$ и показано положение точек ее минимума для различных значений r (1; 0,25 и 0,01).

Область ограничений лежит справа от вертикальной прямой $x = 2$. Нетрудно видеть, что последовательность точек Q_1, Q_2, Q_3 стремится к точке Q – минимуму функции при наличии ограничений. Действительно, найдем минимум функции $\varphi(x, r)$ методом, приведенным в гл. 1:

$$\frac{d\varphi}{dx} = 1 - \frac{r}{(x-2)^2}.$$

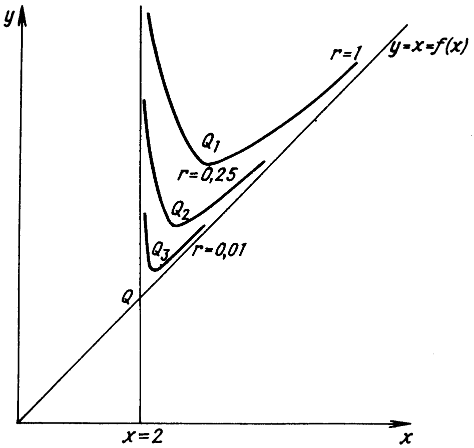

Рис. 7.1

Следовательно, если

$d\varphi/dx = 0, \quad (x-2)^2 = r,$

то

$x = 2 \pm \sqrt{r}\,.$

Тогда

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2r}{(x-2)^3}$$

и минимум достигается при $x = 2 + \sqrt{r}$ внутри области ограничений.

Следовательно, функция $\varphi(x, r)$ имеет минимум, равный $2 + 2\sqrt{r}$ при $x = 2 + \sqrt{r}$. Тогда Q_1 есть точка с координатами (3; 4), Q_2 – точка с координатами (2,5; 3), Q_3 – точка с координатами (2,1; 2,2). Ясно, что при $r \to 0$ минимум без ограничений функции $\varphi(x, r)$ приближается к значению 2 и минимальной точкой является точка $x = 2$.

В общем случае невозможно аналитически определить положение минимума функции $\varphi(x, r)$, рассматривая ее как обычную функцию от r. Для его определения необходимо обратиться к численным методам.

Следует отметить, что если целевая функция $f(\mathbf{x})$ выпукла, а функция $c_j(\mathbf{x})$ вогнута, то функция $\varphi(\mathbf{x}, r)$, заданная уравнением (7.4), также является выпуклой функцией в области ограничений, которая сама является выпуклой. Следовательно, $\varphi(\mathbf{x}, r)$ имеет для данного значения r единственный минимум.

Если $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$ – точки, принадлежащие допустимой области, т. е. $c_j(\mathbf{x}_1) \geqslant 0$ и $c_j(\mathbf{x}_2) \geqslant 0$ для $j = 1, 2, \ldots, m$, то при $0 < \theta < 1$ справедливо неравенство

$$c_j(\theta\mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1) \geqslant \theta c_j(\mathbf{x}_2) + (1-\theta)c_j(\mathbf{x}_1) \geqslant 0,$$

так как функция $c_j(\mathbf{x})$ выпукла. Следовательно, допустимая область является выпуклой.

Таким образом, точка $\mathbf{x}_2 + (1-\theta)\mathbf{x}_1$ при $0<\theta<1$ также является допустимой. (Сравните с упр. 2 разд. 5.3.)

Кроме того, функция $1/c_j(\mathbf{x})$ является выпуклой для всех $\mathbf{x}$, которые удовлетворяют неравенству $c_j(\mathbf{x}) \geqslant 0$. Если $h(\mathbf{x}) = 1/c_j(\mathbf{x})$, то

$$\nabla h(\mathbf{x}) = \frac{-\nabla c_j(\mathbf{x})}{[c_j(\mathbf{x})]^2}.$$

Следовательно, гессиан функции $h(\mathbf{x})$ имеет вид

$$H(\mathbf{x}) = -\frac{\mathbf{C}(\mathbf{x})}{[c_j(\mathbf{x})]^2} + \frac{2\nabla c(\mathbf{x})\,\nabla c(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}}{[c_j(\mathbf{x})]^3},$$

где $\mathbf{C}(\mathbf{x})_{ik} = \partial^2 c_j(\mathbf{x})/\partial x_i \partial x_k$ есть гессиан функции $c_j(\mathbf{x})$. Тогда, если $\mathbf{p}$ – произвольный вектор, то справедливо равенство

$$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}(\mathbf{x})\,\mathbf{p} = -\frac{\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}(\mathbf{x})\,\mathbf{p}}{[c_j(\mathbf{x})]^2} + \frac{2[\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\nabla c_j(\mathbf{x})]^2}{[c_j(\mathbf{x})]^3},$$

где всегда $\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\mathbf{H}(\mathbf{x})\mathbf{p} > 0$, так как $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ – отрицательно определенная матрица ввиду того, что $c_j(\mathbf{x})$ – выпуклая функция и $c_j(\mathbf{x}) \geqslant 0$. Тогда матрица $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ положительно определена и $1/c_j(\mathbf{x})$ выпукла во всей области. (Вернитесь к упр. 11 в разд. 5.5.) Из результата, приведенного в упр. 1 разд. 5.3, следует, что если $r > 0$, то функция $P(\mathbf{x})$, заданная уравнением (7.3), и функция $\varphi(\mathbf{x}, r)$, заданная уравнением (7.4), также выпуклы.

Теперь можно обобщить результат, полученный в примере 1 настоящего раздела на случай общей задачи с ограничениями (см. уравнения (7.1) и (7.2)).

Предположим, что $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \ldots, \mathbf{x}_k^*$ – минимальные точки функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$ для убывающей последовательности значений $r_1, r_2, \ldots, r_k, \ldots$, стремящейся к нулю. Тогда последовательность точек $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \ldots, \mathbf{x}_k^*, \ldots$ сходится к оптимальному решению задачи с ограничениями (см. уравнения (7.1) и (7.2)) при $r_k \to 0$.

Следовательно,

$$\lim \mathbf{x}_k^* = \mathbf{x}^* \tag{7.5}$$

и

$$\lim_{r_k \to 0} [\min \varphi(\mathbf{x}, r_k)] = f(\mathbf{x}^*), \tag{7.6}$$

где $\mathbf{x}^*$ – минимальная точка функции $f(\mathbf{x})$ при наличии ограничений.

Полученный результат можно доказать следующим образом. Поскольку $f(\mathbf{x})$ непрерывная функция и $f(\mathbf{x}^*) \leqslant f(\mathbf{x})$ для всех допустимых точек, то, задав произвольное достаточно малое значение ε, можно найти допустимую точку $\mathbf{x}'$, такую, что

$$f(\mathbf{x}') < f(\mathbf{x}^*) + \varepsilon/2. \tag{7.7}$$

Поскольку r_k – убывающая последовательность, стремящаяся к нулю, можно найти такое значение K, что для $k \geqslant K$ справедливо неравенство

$$r_k \leqslant \left\{ \frac{\varepsilon}{2m} \min_j \left[\frac{1}{c_j(\mathbf{x}')} \right] \right\}. \tag{7.8}$$

Поскольку $P(\mathbf{x}) > 0$ из определения функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$, имеем

$$f(\mathbf{x}^*) \leqslant \min \varphi(\mathbf{x}, r_k) = \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k), \tag{7.9}$$

где $\mathbf{x}_k^*$ – минимальная точка функции $\varphi(\mathbf{x}, r_k)$ для задачи без ограничений.

Кроме того, если $k > K$, то $r_k < r_K$ и справедливо неравенство

$$\varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) \leqslant \varphi(\mathbf{x}_K^*, r_k). \tag{7.10}$$

Это следует из того, что, поскольку $\mathbf{x}_k^*$ минимизирует функцию $\varphi(\mathbf{x}, r_k)$ и в любой другой точке области $\mathbf{x}$, в частности в точке $\mathbf{x}_K^*$, функция будет принимать значение, большее чем $\varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k)$.

Поэтому

$$\varphi(\mathbf{x}_K^*, r_K) = f(\mathbf{x}_K^*) + r_K \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}_K^*)} >$$

$$> f(\mathbf{x}_K^*) + r_k \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}_K^*)},$$

поскольку $r_k < r_K$.

Следовательно,

$$\varphi(\mathbf{x}_K^*, r_K) > \varphi(\mathbf{x}_K^*, r_k).$$

Тогда

$$f(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) \leqslant \varphi(\mathbf{x}_K^*, r_k) < \varphi(\mathbf{x}_K^*, r_K). \tag{7.11}$$

Но так как значение $\mathbf{x}_K^*$ минимизирует функцию $\varphi(\mathbf{x}, r_K)$, то

$$\varphi(\mathbf{x}_K^*, r_K) \leqslant \varphi(\mathbf{x}', r_K) = f(\mathbf{x}') + r_K \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}')}. \tag{7.12}$$

Следовательно, из уравнений (7.11) и (7.12) получим

$$f(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) \leqslant f(\mathbf{x}') + r_K \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}')}. \tag{7.13}$$

Из уравнения (7.8) следует, что

$$f(\mathbf{x}') + r_K \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}')} \leqslant f(\mathbf{x}') + \frac{\varepsilon}{2}. \tag{7.14}$$

Тогда из уравнения (7.7) следует, что

$$f(\mathbf{x}^*) \leqslant \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) < f(\mathbf{x}^*) + \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2}.$$

и

$$\varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) - f(\mathbf{x}^*) < \varepsilon. \tag{7.15}$$

Поскольку ε может быть выбрано произвольно малым, всегда можно найти такое значение k, при котором

$$f(\mathbf{x}^*) < \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) < f(\mathbf{x}^*) + \varepsilon.$$

Таким образом, при $k \to \infty$ $(r_k \to 0)$

$$\lim_{r_k \to 0} \varphi(\mathbf{x}_k^*, r_k) = f(\mathbf{x}^*). \tag{7.16}$$

Из приведенного выше доказательства следует, что при $r_k \to 0$

$$f(\mathbf{x}_k^*) \to f(\mathbf{x}^*) \quad \text{и} \quad r_k \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x}_k^*)} \to 0. \tag{7.17}$$

В качестве упражнения оставлено доказательство того, что $f(\mathbf{x}_1^*)$, $f(\mathbf{x}_2^*)$, ..., $f(\mathbf{x}_k^*)$ образуют убывающую последовательность, такую, что

$$f(\mathbf{x}_{k+1}^*) < f(\mathbf{x}_k^*). \tag{7.18}$$

Очевидно, что если функция $f(\mathbf{x})$ выпукла, а функция $c_j(\mathbf{x})$ при $j = 1, \ldots$ $\ldots, n$ вогнута, то функция $f(\mathbf{x})$ при наличии ограничений имеет единственный минимум. (Сравните с результатами, полученными в разд. 5.3.)

Пример 2

Рассмотрим следующую задачу:

минимизировать функцию $f(x_1, x_2) = \frac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2$
при ограничениях $x_1 - 1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$.

По аналогии с уравнением (7.4) запишем

$$\varphi(\mathbf{x}, r) = \tfrac{1}{3}(x_1 + 1)^3 + x_2 + r\left(\frac{1}{x_1 - 1} + \frac{1}{x_2}\right).$$

Необходимые условия минимума функции φ записываются в виде уравнений

$$(x_1 + 1)^2 - \frac{r}{(x_1 - 1)^2} = 0, \; 1 - \frac{r}{x_2^2} = 0,$$

которые имеют следующее решение:

$$x_1(r) = (1 + \sqrt{r})^{1/2}, \quad x_2(r) = \sqrt{r}.$$

Тогда минимальным значением функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$ будет

$$\varphi^*(r) = \left\{\tfrac{1}{3}[(1 + \sqrt{r})^{1/2} + 1]^3 + \sqrt{r} + r\left[\frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{1}{(1 + \sqrt{r})^{1/2} - 1}\right]\right\} =$$

$$= \left\{\tfrac{1}{3}[(1 + \sqrt{r})^{1/2} + 1]^3 + \sqrt{r} + r\left[\frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{(1 + \sqrt{r})^{1/2} + 1}{\sqrt{r}}\right]\right\} =$$

$$= \{\tfrac{1}{3}[(1 + \sqrt{r})^{1/2} + 1]^3 + \sqrt{r} + \sqrt{r}[1 + 1 + (1 + \sqrt{r})^{1/2}]\}.$$

Таким образом, при $r \to 0$

$x_1(r) \to 1$, $x_2(r) \to 0$

и

$\varphi^*(r) \to f(1;\ 0) = {}^8/_3$.

7.2. МЕТОД SUMT ФИАККО И МАККОРМИКА

Результаты предыдущего раздела показывают, что можно решить задачу минимизации с ограничениями (минимизировать функцию $f(\mathbf{x})$ при ограничениях $c_j(\mathbf{x}) \geqslant 0$), решая для последовательности значений r, стремящейся к нулю, задач без ограничений следующего вида:

минимизировать функцию $\varphi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + r \sum_{j=1}^{m} \dfrac{1}{c_j(\mathbf{x})}$.

Метод SUMT (sequential unconstrained minimisation technique) был впервые предложен Кэрролом в 1961 году. Его идеи были исследованы Фиакко и Маккормиком, которые не только рассмотрели теоретические вопросы и сходимость метода, но создали практическую систему для его реализации.

Редко можно будет использовать данный метод так, как это делалось в двух примерах из предыдущего раздела, поскольку далеко не всегда можно найти оптимальную точку для функций $\varphi(\mathbf{x}, r)$ в виде функции $\mathbf{x}^*(r)$, предел которой при $r \to 0$ можно исследовать.

Поэтому для того, чтобы можно было применить настоящий метод на практике, необходимо построить вычислительный метод, использующий теоретическое свойство сходимости, рассмотренное в предыдущем разделе. Теоретически здесь не возникает трудностей. Для заданных функцией $f(\mathbf{x})$ ограничениях $c_j(\mathbf{x}) \geqslant 0$, $j = 1, \ldots, n$, необходимо выбрать начальное значение $r = r_0$, чтобы сформировать функцию $\varphi(\mathbf{x}, r_0)$, которая минимизируется без ограничений методом ДФП, изложенным в гл. 4. Найдя минимум функции $\varphi(\mathbf{x}, r_0)$, необходимо уменьшить значение r. Это можно сделать эффективно и просто, если найти $r_1 = r_0/c$, где константа $c > 1$. В приведенной ниже программе $c = 10$, однако этот выбор произволен. Удачными могут быть также значения $c = 12$, $c = 16$ и т. д. Затем необходимо минимизировать функцию $\varphi(\mathbf{x}, r_1)$, снова используя метод ДФП. Таким образом, будет разработана итерационная процедура. На k-м шаге минимизируется функция $\varphi(\mathbf{x}, r_k)$, минимум которой находится в точке $\mathbf{x}_k^*$. Важно, что ее можно использовать в дальнейшем в качестве первой точки в итерационной процедуре минимизации функции $\varphi(\mathbf{x}, r_{k-1})$, где $r_{k+1} = r_k/c$. Теперь ясно, что последовательность r_k убывает и стремится к нулю, следовательно, последовательность точек минимумов будет сходиться к решению задачи с ограничениями.

Ниже приведена блок-схема (рис. 7.2) метода SUMT. Остается уточнить некоторые детали.

Предполагается, что в начале процедуры имеется допустимая точка. Важно, чтобы в процессе последующих вычислений получаемые точки принадлежали допустимой области. Метод ДФП является градиентным методом минимизации, использующим при одномерном поиске кубическую интерполяцию. Тогда, по мере приближения точки $\mathbf{x}$ к границе внутри допустимой области $\varphi(\mathbf{x}, r) \to \infty$, а по мере приближения точки $\mathbf{x}$ к границе снаружи допустимой области $\varphi(\mathbf{x}, r) \to -\infty$. Таким образом, если поиск осуществляется

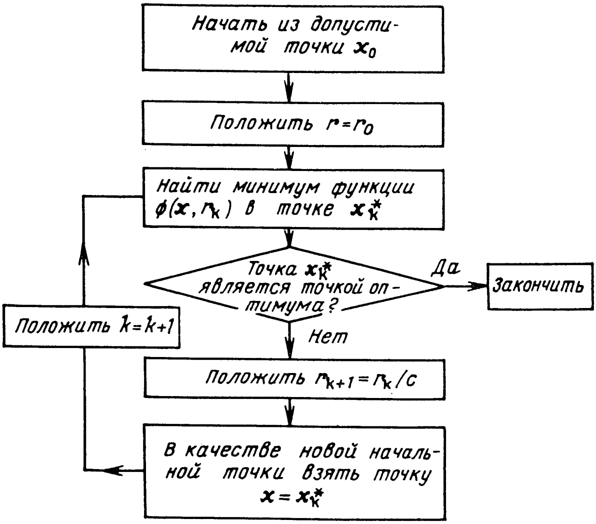

Рис. 7.2

вдоль прямой, соединяющей две точки, одна из которых лежит внутри, а другая вне области ограничений, то кубическая интерполяция оказывается неприемлемой, поскольку функция разрывна вдоль данной прямой. Действительно, если минимум будет найден вне допустимой области, то метод ДФП не позволит вновь войти в область ограничений. Необходимо тщательно исследовать такие вопросы при использовании метода ДФП в данной задаче.

Выбор начального значения r может оказаться важным с точки зрения сокращения числа итераций при минимизации функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$. Если сначала r выбрано очень малым, для того чтобы функция $\varphi(\mathbf{x}, r)$ мало отличалась от функции $f(\mathbf{x})$, то метод будет сходиться очень быстро. Однако такой выбор может привести к серьезным осложнениям при вычислениях. Как видно из рис. 7.1, для малых r функция $\varphi(\mathbf{x}, r)$ будет быстро меняться в окрестности минимума, что может вызвать затруднения при использовании градиентного метода. Слишком же большое значение r может привести к тому, что штрафная функция $P(\mathbf{x})$ в уравнении (7.4) станет доминирующей. Поэтому "разумный" выбор начальной точки очень важен.

Для многих задач "разумным" значением для начальной точки является значение $r_0 = 1$. Более рациональный подход состоит в том, чтобы понять, что если начальная точка $\mathbf{x}$ будет лежать вблизи минимума функции

$$\varphi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + r \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(\mathbf{x})} = f(\mathbf{x}) + rP(\mathbf{x}),$$

то градиент функции $\varphi(\mathbf{x}, r)$ будет мал:

$$\nabla\varphi(\mathbf{x}, r) = \nabla f(\mathbf{x}) + r\nabla P(\mathbf{x}). \tag{7.19}$$

Квадрат нормы этого вектора

$$\nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\, \nabla f(\mathbf{x}) + 2r\nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\, \nabla P(\mathbf{x}) + r^2\, \nabla P(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\, \nabla P(\mathbf{x}) \qquad (7.20)$$

и минимум будет достигнут при

$$r = \frac{-\nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\, \nabla P(\mathbf{x})}{\nabla P(\mathbf{x})^{\mathrm{T}}\, \nabla P(\mathbf{x})}. \qquad (7.21)$$

Это начальное значение r, как предполагает Фиакко и Маккормик, должно давать хорошие результаты в общем случае. Уменьшить значение r очень просто: $r_{k+1} = r_k/c$, где $c = 10$.

Для минимизации функции $\varphi(\mathbf{x}, r_{k+1})$ используется метод ДФП. В качестве начальной точки используется оптимальная точка функции $\varphi(\mathbf{x}, r_k)$, и это оказывается очень эффективным. Программа аналогична программе, приведенной в гл. 4, однако необходимо обратить внимание на то, чтобы в процессе одномерного поиска не выйти за область ограничений. Грубым, но вполне эффективным является следующий метод. Пусть имеются точка $\mathbf{p}$ и направление поиска $\mathbf{d} = -\mathbf{Hg}$ (см. соотношение (4.34)). Следующая точка $\mathbf{q} = \mathbf{p} + \lambda\mathbf{d}$ необходима для осуществления кубической интерполяции. Начнем со значения $\lambda = 2$ (удвоенный шаг в методе Ньютона) и проверим, является ли точка q допустимой, т. е. выполняется ли неравенство $c_j(\mathbf{q}) > 0$ для всех j. Если оно выполняется, то λ не меняется, но если неравенство не выполняется, то λ заменяется на λ/a, находится новая точка $\mathbf{q}$ и вновь производится проверка. В конце концов допустимая точка $\mathbf{q}$ будет найдена, и тогда можно осуществить интерполяцию. Выбор значения a не вполне очевиден. Выбор $a = 2$ был успешным, при $a = 1{,}05$ длина шага становится близкой к расстоянию до ближайшей границы области ограничений и поэтому является "безопасной" для интерполяционной процедуры. (Эти шаги выполняются в программе в строках 630 – 750.)

Важно не дать точкам выйти за область ограничений в процессе минимизации. Для этого в строках 1100 – 1220 были приняты меры предосторожности, позволяющие убедиться в том, что минимум найден между двумя допустимыми точками. Хотя изменение $\mathbf{H}$ в строке 1110 является полуэвристическим, он кажется вполне удачным.

Функция $\varphi(\mathbf{x}, r)$ минимизируется до тех пор, пока два последовательных значения F_1 и F_2 не станут такими, что $|(F_1 - F_2)/F_1| < 0{,}000001$. Это условие, конечно, может быть изменено (строка 1570). В соответствии с соотношением (7.17) программа заканчивает работу, когда (строка 1600)

$$r \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(x_k^*)} < 0{,}000\,001.$$

Значение минимума $f(\mathbf{x})$ при этом определяется с точностью до пяти десятичных цифр. Конечно, точность можно изменить. Критерий завершения осуществляет остановку программы при $r_k < 10^{-12}$.

Ниже приведен текст программы. Подпрограммы, в том виде как они написаны, предназначены для решения следующей задачи:

минимизировать функцию $f(\mathbf{x}) = (x_1 - 1)(x_1 - 2)(x_1 - 3) + x_3$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0$, $x_2 \geqslant 0$, $x_3 \geqslant 0$, $x_3^2 - x_1^2 - x_2^2 \geqslant 0$, $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 4 \geqslant 0$, $x_3 \leqslant 5$.

Таким образом, чтобы

$$\varphi(\mathbf{x}, r) = f(\mathbf{x}) + r\left(\frac{1}{x_3^2 - x_1^2 - x_2^2} + \frac{1}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 4} + \frac{1}{5 - x_3} + \frac{1}{x_1} + \frac{1}{x_2} + \frac{1}{x_3}\right).$$

Итак, мы имеем задачу с тремя переменными и шестью ограничениями. Целевая функция не выпукла. Область ограничений тоже не является выпуклой, однако данный метод применяется успешно. При начальной точке (0,1; 2; 2,1) решение было найдено за 48 итераций. Истинный минимум достигается в точке $(0;\ \sqrt{2},\ \sqrt{2})$, значение функции в которой равно $-6 + \sqrt{2}$. Приведены первая и последняя страницы распечатки результатов работы программы. Предыдущее значение r, при котором была достигнута оптимальная точка, используется для определения следующего значения r, и оно выводится на печать через небольшое число итераций, необходимое для поиска последнего минимума.

```
20 PRINT "  МЕТОД ФИАККО И МАККОРМИКА"
40 REM ФУНКЦИЯ Z=F(X1,X2,...,XN) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 5000
60 REM ГРАДИЕНТ G(1),G(2),...,G(N) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ В СТРОКЕ 6000
80 REM ОГРАНИЧЕНИЯ C(1),C(2),...,C(M) ВЫЧИСЛЯЮТСЯ В СТРОКЕ 8000
100 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ":INPUT N
120 PRINT "ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ОГРАНИЧЕНИЙ":INPUT M
140 DIM X(N),P(N),Y(N),U(N),G(N),CG(N),D(N)
145 DIM V(N),R(N),Q(N),M(N)
150 DIM H(N,N)
160 DIM C(M),IC(M)
180 PRINT "ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XN"
190 FOR I=1 TO N:INPUT X(I):NEXT I
200 REM ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНИЯ ОГРАНИЧЕНИЙ
205 REM IC(J)=0 - ОГРАНИЧЕНИЕ J ВЫПОЛНЕНО
207 REM IC(J)=1 - ОГРАНИЧЕНИЕ J НАРУШЕНО
210 S=0
220 FOR II=1 TO M:GOSUB 8000
230 IF C(II)<0 THEN S=S+1:IC(II)=1
240 NEXT II
250 IF S>0 THEN PRINT "ПЕРВАЯ ТОЧКА НЕ ЯВЛЯЕТСЯ ДОПУСТИМОЙ":STOP
270 REM НАЙТИ НАЧАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ R
290 T=0:B=0:R=0:CC=0
300 GOSUB 6000
310 FOR I=1 TO N
320 T=T-G(I)*CG(I):B=B+CG(I)*CG(I):NEXT I
350 R=T/B
360 IF R<0 THEN R=1
410 PRINT "R="R
420 REM В НАЧАЛЕ НОВОГО ЭТАПА МИНИМИЗАЦИИ
425 REM ЗАДАТЬ МАТРИЦУ H РАВНОЙ ЕДИНИЧНОЙ МАТРИЦЕ
430 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO N
440 H(I,J)=0:NEXT J
450 H(I,I)=1:NEXT I
460 REM ПРОМЕЖУТОЧНЫЙ ВЫВОД
480 PRINT "        ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ"
500 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):Y(I)=X(I):PRINT "X";I,X(I):NEXT I
510 FOR II=1 TO M:GOSUB 8000:NEXT II:GOSUB 5000
520 PRINT "ИТЕРАЦИЯ";CC;"  ЗНАЧЕНИЕ";Z
530 FP=Z:GOSUB 6000:G1=G0:FF=Z
540 REM ЗАПОМНИТЬ ГРАДИЕНТ В МАССИВЕ U И ПЕРЕЙТИ К СЛЕДУЮЩЕМУ НАПРАВЛЕНИЮ
```

```
550 FOR I=1 TO N
560 U(I)=G(I):D(I)=0
570 FOR J=1 TO N
580 D(I)=D(I)-H(I,J)*G(J)
590 NEXT J:NEXT I
595 REM НАЙТИ ГРАДИЕНТ В ПЕРВОЙ ТОЧКЕ ОДНОМЕРНОГО ПОИСКА
600 GP=0
610 FOR I=1 TO N:GP=GP+G(I)*D(I):NEXT I
620 IF GP>0 THEN PRINT "ФУНКЦИЯ ВОЗРАСТАЕТ (СТРОКА 620)"
625 REM НАЙТИ ЗНАЧЕНИЕ LAMBDA,ТАКОЕ,
627 REM ЧТОБЫ ОГРАНИЧЕНИЯ НЕ БЫЛИ НАРУШЕНЫ
630 L=2
640 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+L*D(I):NEXT I
650 S=0
660 FOR II=1 TO M
670 IC(II)=0:GOSUB 8000
680 IF C(II)>=0 THEN GOTO 730
690 IC(II)=1:S=S+1
700 L=L/1.05
710 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+L*D(I):NEXT I
720 GOTO 670
730 NEXT II
750 IF S>0 THEN GOTO 650
1000 REM НАЙТИ СЛЕДУЮЩУЮ ТОЧКУ Q
1010 HH=L
1020 FOR I=1 TO N
1030 Q(I)=P(I)+HH*D(I):X(I)=Q(I)
1040 NEXT I
1050 FOR II=1 TO M:GOSUB 8000:NEXT II:GOSUB 5000:FQ=Z
1060 GOSUB 6000:G2=G0
1080 GQ=0
1090 FOR I=1 TO N:GQ=GQ+G(I)*D(I):NEXT I
1095 REM ЕСЛИ МИНИМУМ НЕ ЛЕЖИТ МЕЖДУ ТОЧКАМИ P И Q,
1096 REM ЗАМЕНИТЬ P НА Q
1097 REM МОДИФИЦИРОВАТЬ H И НАЙТИ НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ
1100 IF GQ<0 AND FQ<FP THEN GOTO 1110
1105 GOTO 1125
1110 FOR I=1 TO N:FOR J=1 TO N:H(I,J)=H(I,J)-D(I)*D(J)/GP:NEXT J
1115 P(I)=Q(I):X(I)=P(I):Y(I)=X(I):NEXT I
1120 FF=Z:FP=Z:G1=G0:GOTO 540
1125 REM ДАЛЕЕ ПРОИЗВОДИТСЯ КУБИЧЕСКАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
1130 ZZ=3*(FP-FQ)/HH:ZZ=ZZ+GP+GQ
1140 WW=ZZ*ZZ-GP*GQ:IF WW<0 THEN WW=0
1150 W=SQR(WW)
1160 DD=HH*(1-(GQ+W-ZZ)/(GQ-GP+2*W))
1170 FOR I=1 TO N:X(I)=P(I)+DD*D(I):NEXT I
1180 FOR II=1 TO M:GOSUB 8000:NEXT II:GOSUB 5000:FR=Z:GOSUB 600(
1195 REM НАЙТИ ГРАДИЕНТ В НОВОЙ ТОЧКЕ
1200 GR=0
1210 FOR I=1 TO N:GR=GR+G(I)*D(I):NEXT I
1215 REM ПОВТОРИТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИЮ В НОВОМ ИНТЕРВАЛЕ
1216 REM (СТРОКИ 1260 ИЛИ 1290), ЛИБО ПРОДОЛЖИТЬ
1220 IF Z<=FP AND Z<=FQ THEN GOTO 1400
1230 IF GR>0 THEN GOTO 1290
1260 HH=HH-DD
1270 FOR I=1 TO N:P(I)=X(I):NEXT I
1280 FP=Z:GP=GR:G1=G0:GOTO 1130
1290 HH=DD
1300 FOR I=1 TO N:Q(I)=X(I):NEXT I
1310 FQ=Z:GQ=GR:G2=G0:GOTO 1130
1350 REM ОБНОВИТЬ МАТРИЦУ H
1400 KK=0:WK=0:DK=0
1410 FOR I=1 TO N
1420 U(I)=G(I)-U(I):V(I)=X(I)-Y(I)
1430 NEXT I
```

```
1440 FOR I=1 TO N:M(I)=0
1450 FOR J=1 TO N
1460 M(I)=M(I)+H(I,J)*U(J)
1470 NEXT J
1480 KK=KK+M(I)*U(I):WK=WK+V(I)*U(I)
1500 NEXT I
1505 IF KK=0 OR WK=0 THEN GOTO 1560
1510 FOR I=1 TO N
1520 FOR J=1 TO N
1530 H(I,J)=H(I,J)-M(I)*M(J)/KK+V(I)*V(J)/WK
1540 NEXT J
1550 NEXT I
1560 CC=CC+1
1565 REM ПРОВЕРКА ДОСТИЖЕНИЯ МИНИМУМА ФУНКЦИИ PHI(X,R)
1570 IF ABS((FF-Z)/FF)<.00001 THEN GOTO 1600
1575 REM ЕСЛИ СХОДИМОСТЬ НЕ ДОСТИГНУТА,
1577 REM ТО НАЧАТЬ НОВЫЙ ОДНОМЕРНЫЙ ПОИСК ИЗ ПОСЛЕДНЕЙ ТОЧКИ
1580 FF=Z:GOTO 500
1590 REM ОКОНЧАТЕЛЬНАЯ ПРОВЕРКА СХОДИМОСТИ;
1595 REM ЕСЛИ СХОДИМОСТЬ НЕ ДОСТИГНУТА,
1597 REM ТО УМЕНЬШИТЬ R И СФОРМИРОВАТЬ НОВУЮ ФУНКЦИЮ PHI(X,R)
1600 IF R*Z2<.00001 THEN GOTO 1800
1610 R=R/10
1620 GOTO 410
1800 PRINT " "
1820 FOR I=1 TO N
1830 PRINT "X";I;"=";X(I)
1840 NEXT I
1850 PRINT "F(X)=";Z1
2000 END
5000 REM ФУНКЦИЯ F(X) ВЫЧИСЛЯЕТСЯ КАК ФУНКЦИЯ ОТ Z1,
          А P(X) КАК ФУНКЦИЯ ОТ Z2
5010 Z1=(X(1)-1)*(X(1)-2)*(X(1)-3)+X(3)
5100 Z2=0
5110 FOR JJ=1 TO M:Z2=Z2+1/C(JJ):NEXT JJ
5200 Z=Z1+R*Z2
5500 RETURN
6000 REM РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИИ F(X) ХРАНЯТСЯ
          В МАССИВЕ G(1)..G(N)
6005 REM РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ГРАДИЕНТА ФУНКЦИИ P(X) ХРАНЯТСЯ
          В МАССИВЕ CG(1)..CG(N)
6010 REM ЗАТЕМ ОНИ СУММИРУЮТСЯ В МАССИВЕ G(1)..G(N)
6050 KA=X(1)-1:KB=X(1)-2:KC=X(1)-3
6100 G(1)=KA*KB+KB*KC+KC*KA
6150 CG(1)=-(-2*X(1)/(C(1)*C(1))+2*X(1)/(C(2)*C(2))+
            1/(C(4)*C(4)))
6190 G(1)=G(1)+R*CG(1)
6200 G(2)=0
6250 CG(2)=-(-2*X(2)/(C(1)*C(1))+2*X(2)/(C(2)*C(2))+
            1/(C(5)*C(5)))
6290 G(2)=G(2)+R*CG(2)
6300 G(3)=1
6350 CG(3)=-(2*X(3)/(C(1)*C(1))+2*X(3)/(C(2)*C(2))-
           1/(C(3)*C(3)))
6360 CG(3)=CG(3)-1/(C(6)*C(6))
6390 G(3)=G(3)+R*CG(3)
6900 G0=0
6910 FOR JJ=1 TO N:G0=G0+G(JJ)*G(JJ):NEXT JJ
6920 G0=SQR(G0)
6990 RETURN
8000 REM РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ОГРАНИЧЕНИЙ ХРАНЯТСЯ
          В МАССИВЕ C(1),C(2)...C(M)
8005 ON II GOTO 8010,8020,8030,8040,8050,8060
8010 C(1)=X(3)*X(3)-X(1)*X(1)-X(2)*X(2):GOTO 8500
8020 C(2)=X(1)*X(1)+X(2)*X(2)+X(3)*X(3)-4:GOTO 8500
8030 C(3)=5-X(3):GOTO 8500
```

```
8040 C(4)=X(1):GOTO 8500
8050 C(5)=X(2):GOTO 8500
8060 C(6)=X(3):GOTO 8500
8500 RETURN
```

```
   МЕТОД ФИАККО И МАККОРМИКА
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ПЕРЕМЕННЫХ
 3
ВВЕДИТЕ ЧИСЛО ОГРАНИЧЕНИЯ
 6
ВВЕДИТЕ НАЧАЛЬНУЮ ТОЧКУ X1,X2,...,XI
 .1
 2
 2.1
R= .0901618
        ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              .1
X 2              2
X 3              2.1
ИТЕРАЦИЯ 0    ЗНАЧЕНИЕ-1.592473
X 1              7.556441E-02
X 2              1.941576
X 3              2.13685
ИТЕРАЦИЯ 1    ЗНАЧЕНИЕ-1.617675
X 1              .0953003
X 2              1.893447
X 3              2.162587
ИТЕРАЦИЯ 2    ЗНАЧЕНИЕ-1.671175
X 1              9.550905E-02
X 2              1.502009
X 3              1.773026
ИТЕРАЦИЯ 3    ЗНАЧЕНИЕ-1.980767
X 1              9.558208E-02
X 2              1.360921
X 3              1.633317
ИТЕРАЦИЯ 4    ЗНАЧЕНИЕ-1.995453
X 1              9.520754E-02
X 2              1.420405
X 3              1.686592
ИТЕРАЦИЯ 5    ЗНАЧЕНИЕ-2.014785
R= 9.016181E-03
        ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              9.552066E-02
X 2              1.418278
X 3              1.66902
ИТЕРАЦИЯ 6    ЗНАЧЕНИЕ-3.202302
X 1              3.626825E-02
X 2              1.418279
X 3              1.663025
ИТЕРАЦИЯ 7    ЗНАЧЕНИЕ-3.659234
X 1              .0286065
X 2              1.418742
X 3              1.502301
ИТЕРАЦИЯ 8    ЗНАЧЕНИЕ-3.787412
X 1              2.960457E-02
X 2              1.40907
X 3              1.492017
ИТЕРАЦИЯ 9    ЗНАЧЕНИЕ-3.78796
X 1              2.972558E-02
X 2              1.41197
X 3              1.490826
ИТЕРАЦИЯ 10    ЗНАЧЕНИЕ-3.788081
X 1              2.896714E-02
X 2              1.4137
X 3              1.49338
```

```
ИТЕРАЦИЯ 11    ЗНАЧЕНИЕ-3.78841
R= 9.01618E-04
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              2.909472E-02
X 2              1.413903
X 3              1.494199
ИТЕРАЦИЯ 12    ЗНАЧЕНИЕ-4.150575
R= 9.016181E-09
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              1.084033E-04
X 2              1.414218
X 3              1.414491
ИТЕРАЦИЯ 35    ЗНАЧЕНИЕ-4.58421
X 1              3.620311E-05
X 2              1.414218
X 3              1.414484
ИТЕРАЦИЯ 36    ЗНАЧЕНИЕ-4.584845
X 1              3.630842E-05
X 2              1.414217
X 3              1.414308
ИТЕРАЦИЯ 37    ЗНАЧЕНИЕ-4.584977
R= 9.016181E-10
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              3.63019E-05
X 2              1.414206
X 3              1.414307
ИТЕРАЦИЯ 38    ЗНАЧЕНИЕ-4.585262
X 1              1.296428E-05
X 2              1.414206
X 3              1.414305
ИТЕРАЦИЯ 39    ЗНАЧЕНИЕ-4.585476
R= 9.016181E-11
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              1.30049E-05
X 2              1.414207
X 3              1.41425
ИТЕРАЦИЯ 40    ЗНАЧЕНИЕ-4.585598
X 1              4.401657E-06
X 2              1.414207
X 3              1.414249
ИТЕРАЦИЯ 41    ЗНАЧЕНИЕ-4.58568
R= 9.016181E-12
         ТЕКУЩИЕ ЗНАЧЕНИЯ
X 1              4.414079E-06
X 2              1.414208
X 3              1.41423
ИТЕРАЦИЯ 42    ЗНАЧЕНИЕ-4.585719
МИНИМУМ НАЙДЕН
X 1 = 1.619098E-06
X 2 = 1.414208
X 3 = 1.41423
F(X)=-4.585752
```

7.3. ЛИТЕРАТУРА

Замечание, сделанное в разд. 4.5, справедливо и здесь. За последнии три десятилетия в этой области был выполнен большой объем исследований, которые продолжаются и в настоящее время. В двух последних главах были подробно рассмотрены два важных метода оптимизации при наличии ограничений. Но это лишь два метода среди множества других методов. Мы надеемся, что читатель заинтересуется изучением приведенного ниже списка литературы, поскольку еще многое можно сделать для развития теории и вычислительных методов решения задач оптимизации с ограничениями.

1 M. J. Box, 'A comparison of several current optimisation methods and the use of transformations in constrained problems', *Comp. Journal*, **9**, 67–77, 1966.

2 C. W. Carroll, 'The created response surface technique for optimising nonlinear restrained systems'. *Operations Research*, **9**, 169–184, 1961.

3 A. R. Colville, 'A comparative study on nonlinear programming codes', *IBM Report* No. 320–2949, 1968.

4 A. V. Fiacco and G. P. McCormick, 'The Sequential Unconstrained Minimisation Technique for nonlinear programming, a primal–dual method', *Man. Sc.*, **10**, 360–366, 1964.

5 A. V. Fiacco and G. P. McCormick, 'Computational algorithm for the Sequential Unconstrained Minimisation Technique for nonlinear programming', *Man. Sc.*, **10**, 601–617, 1964.

6 A. V. Fiacco and G. P. McCormick, 'Extensions of SUMT for nonlinear programming: equality constraints and extrapolation', *Man. Sc.*, **12**, 816–828, 1966.

7 D. Goldfarb, 'Extensions of Davidon's variable metric method to maximisation under linear inequality and equality constraints', *SIAM J. Appl. Math.*, **17**, 739–764, 1969.

7.4. УПРАЖНЕНИЯ

1. Используя метод SUMT, минимизируйте функцию $f(x_1, x_2) = 3x_1^2 + 4x_1x_2 + 5x_2^2$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_1 + x_2 \geqslant 4$.
2. Минимизируйте функцию $f(x_1, x_2) = -x_1^2 - x_2^2$ при ограничениях $x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0$ и $x_1 + 2x_2 \leqslant 3$.
3. Используя метод SUMT, решите задачу о почтовых посылках: минимизируйте функцию $V = -x_1x_2x_3$ при ограничениях $0 \leqslant x_i \leqslant 42$, где $i = 1, 2, 3$ и $x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leqslant 72$.
4. Используя метод SUMT, минимизируйте функцию

$$f(x_1, x_2) = \frac{4}{x_1} + \frac{9}{x_2} + (x_1 + x_2)$$

при ограничениях $x_1 \geqslant 0, x_2 \geqslant 0, x_1 + x_2 \leqslant S$, где а) $S = 6$, б) $S = 4$.

5. Минимизируйте функцию $f(\mathrm{x}) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ при ограничениях $x_1 + x_2 + x_3 \geqslant 3$, $x_1x_2x_3 \geqslant 3, x_1, x_2, x_3 \geqslant 0$.
6. Поэкспериментируйте с программой SUMT, изменив начальный выбор r (строка 360), определение λ (строка 700), уменьшение r (строка 1610).
7. Поэкспериментируйте с программой метода SUMT, изменив критерий сходимости в строке 1570, в строке 1600. В последнем случае попробуйте условие IF R < IE – 12.
8. Покажите, что соотношение (7.18) истинно, т. е. $f(\mathrm{x}^*_{k+1}) < f(\mathrm{x}^*_k)$.
9. Минимизируйте функцию $(x_1 - 1)^4 + (x_2 - 3)^2$, если $x_1, x_2 \geqslant 0$ и $3x_1^2 + 2x_2^2 \leqslant 21$, $4x_1 + 5x_2 \leqslant 20$.
10. Минимизируйте функцию $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ при ограничениях $x_1 \geqslant 2, x_1^2 - x_2^2 \leqslant 1$.

РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

Исследования в области оптимизации продолжают интенсивно проводиться. Мы надеемся, что читатели уже заинтересованы настолько, что готовы к изучению последних достижений в этой области. Приведенный список является лишь малой частью из большого числа книг и журнальных статей по данному вопросу.

P. R. Adby and M. A. H. Dempster, *Introduction to Optimisation Methods*, Chapman and Hall, 1974.

D. P. Bertsekas, 'Combined primal–dual and penalty function methods,' *SIAM Journal on Control*, **13**, 521–545, 1975.

D. P. Bertsekas, *Constrained Optimisation and Lagrange Multiplier Methods*, Academic Press, 1982. **[Имеется перевод: Д. Бертсекас. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1987. – 000 с.]**

B. D. Craven, *Mathematical Programming and Control Theory*, Chapman and Hall, 1978.

J. E. Dennis and J. J. Moré, 'Quasi-Newton methods, motivation and theory', *SIAM Review*, **19**, 46–89, 1977.

R. Fletcher, 'An ideal penalty function for constrained optimisation', *J. Inst. Maths. App.*, **15**, 319–342, 1975.

P. E. Gill, W. Murray and M. H. Wainwright. *Practical Optimization*. Academic Press, 1982. [Имеется перевод: Ф. Гилл, У. Мюррей, М. Райт. Практическая оптимизация: Пер. с англ. – М.: Мир, 1985.– 509 с.]

S-P. Han, 'A globally convergent method for nonlinear programming', *J. Opt. Theory App.*, **22**, 297–309, 1977.

M. R. Hestenes, *Conjugate Direction Methods in Optimization*, Springer–Verlag, 1980.

D. Q. Mayne and N. Maratos, 'A first order exact penalty function algorithm for equality constrained optimisation problems', *Math. Prog.*, **16**, 303–324, 1979.

M. J. D. Powell, 'Some convergence properties of the conjugate gradient method', *Math. Prog.*, **11**, 42–49, 1976.

M. J. D. Powell, 'Algorithms for nonlinear constraints that use Lagrangian functions', *Math. Prog.*, **14**, 224–248, 1978.

M. J. D. Powell, 'A fast algorithm for nonlinearly constrained optimisation calculations', (in *Numerical Analysis*, Edited by G. A. Watson), 144–157, Springer–Verlag, 1978.

M. J. D. Powell (Editor), *Nonlinear Optimization*, Academic Press, 1982.

D. Shanno, 'Conjugate gradient methods with inexact searches', *Maths. of Op. Res.*, **3**, 244–256, 1978.

ОТВЕТЫ К УПРАЖНЕНИЯМ

1.4. УПРАЖНЕНИЯ

1. Локальный максимум равен 4/27 при $x = 1/13$; локальный минимум равен нулю при $x = 1$.
2. Максимум равен 1/2 при $x = 1$, минимум равен $-1/2$ при $x = -1$.
3. Отметим, что $a \cos\theta + b \sin\theta \equiv \sqrt{(a^2 + b^2)} \cos(\theta - \alpha)$, где $\operatorname{tg}\alpha = b/a$.
4. $A = r^2 \sin 2\theta\,(1 + \cos 2\theta)$.
5. Хотя $f'(x)$ изменяет свой знак с "–" на "+", но производная $f'(0)$ не определена.
6. Минимум равен нулю при $x = 0$. Хотя $f'(x)$ изменяет свой знак с "–" на "+", но производная $f'(x)$ не определена.
7. Минимум функции равен $-1/3\sqrt{3}$.
9. Глобальный минимум равен –24,3696 в точке 0,7808; локальный максимум равен 40,7245 в точке 3,7619; локальный минимум равен 11,9676 в точке 5,9572.
10. Минимум равен 0 в точке (0; 0).
11. Максимум равен 0 в точке (0; 0; 0).
15. Уравнения для p_1 и p_2 имеют следующий вид:

$$-2b_1 p_1 + (a_1 + a_2) p_2 + c_1 b_1 - c_2 a_2 = 0,$$
$$(a_1 + a_2) p_1 - 2b_2 p_2 + c_2 b_2 - c_1 a_1 = 0.$$

16. Минимум равен –0,2766 при $x = 0{,}5885$.

2.8. УПРАЖНЕНИЯ

4. Минимальное число необходимых точек равно 198.
5. Минимум функции лежит в точке $x = 0{,}47$.
6. Минимум равен 5,96 и найден за 12 итераций.
7. Минимум функции равен 2,32 в точке $x = 0{,}47$ и найден за 11 итераций.
9. Минимум функции равен –0,973 в точке $x = 1{,}763$.
10. Минимум функции равен 0,0465 в точке (0,2558; –0,1163).
15. Решением уравнения является $x = 0{,}5885$.

3.5. УПРАЖНЕНИЯ

2. 1) Минимум функции равен 0 в точке (1; 2; 3). 2) Минимум функции равен 0 в точке (1; 1).
6. 1) Минимум функции равен 0 в точке (1; 1). 2) Минимум функции равен 0 в точке (0; 0; 0). 3) Минимум функции равен 0 в точке (1; 10).
10. Минимум функции равен 0 в точке (1; 0).
11. Минимум функции равен 0 в точке (3; 2).
12. Система имеет следующие решения для x_1, x_2: (3; 2), (3,5844; −1,8481), (−3,7793; −3,2832), (−2,8011; 3,1313).
13. Система имеет следующие решения: $x = 1, y = 2, z = 3$ или любая их перестановка.
14. $a = 31{,}87$, $b = 1{,}79$.
15. 1) $\ln(a) = 3{,}0296, a = 20{,}68, n = 2{,}48$. 2) $a = 22{,}3, n = 2{,}45$.

4.6. УПРАЖНЕНИЯ

6. Минимум равен 0 в точке (4; −3; −05).
7. Минимум равен 0 в точке (0,25; 0,75).
8. Минимум равен 0 в точке (1; 0).
9. Минимум равен 0 в точке (3; 2). (См. также упр. 12).
10. Минимум равен −1 в точке (1; 1).

5.5. УПРАЖНЕНИЯ

3. $x = \dfrac{kbc}{A}, y = \dfrac{kac}{A}, z = \dfrac{kab}{A}$, где $A = ab + bc + ca$.
5. Максимум равен 108 в точке (1; 2; 3).
7. Минимум равен 12,5 при $x = y = 2{,}5$.
8. Минимум функции равен −371/196 в точке $x = 9/14, y = 1/17$.
13. Максимум равен 70, минимум равен 20.
14. Если $\sqrt{\alpha} + \sqrt{\beta} \leqslant S\sqrt{\gamma}$, то $x_1 = \sqrt{\alpha/\beta}$, $x_2 = \sqrt{\beta/\gamma}$. В противном случае $x_1 = S\sqrt{\alpha}/(\sqrt{\alpha} + \sqrt{\beta})$, $x_2 = S\sqrt{\beta}/(\sqrt{\alpha} + \sqrt{\beta})$. Посылка имеет размеры $x_1 = 20$ см, $x_2 = 11$ см, $x_3 = 15$ см, и ее объем равен 3300 см^3.
16. Посылка имеет размеры $x_1 = 24$ см, $x_2 = 12$ см, $x_3 = 12$ см, и ее объем равен 3456 см^3.

6.4. УПРАЖНЕНИЯ

1. Минимум равен 12,5 при $x = y = 2{,}5$.
2. Минимум равен −371/196 при $x = 9/14, y = 1/7$.
3. Минимум равен 44 при $x_1 = 3, x_2 = 1$.
5. Минимум достигается при $x_1 = 2, x_2 = 3$; $x_1 = 8/5, x_2 = 12/5$.
6. Минимум равен 1 при $x = 3, x_2 = \sqrt{3}$.
7. Минимум равен 30, 24 при $x_1 = 1{,}7818, x_2 = 4{,}4898$.
8. Минимум равен 6,2403 при $x_1 = x_2 = x_3 = 1{,}4422$.
9. Минимум равен 0 при $x_1 = 3, x_2 = 4$.
10. Минимум равен −28,6153 при $x_1 = 2{,}9155, x_2 = 4{,}1231, x_3 = 2{,}3805$.

7.4. УПРАЖНЕНИЯ

1. Минимум равен 44 при $x_1 = 3, x_2 = 1$.
2. Минимум равен −9 при $x_1 = 3, x_2 = 0$.
3. Минимум равен −3456 при $x_1 = 24, x_2 = 12, x_3 = 12$.
4. а) Минимум равен 10 при $x_1 = 2, x_2 = 3$; б) минимум равен 41/4 при $x_1 = 8/5$, $x_2 = 12/5$.
5. Минимум равен 6,2403 при $x_1 = x_2 = x_3 = 1{,}4422$.
9. Минимум равен 0 при $x_1 = 1, x_2 = 3$.
10. Минимум равен 7 при $x_1 = 2, x_2 = \sqrt{3}$.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Производственное издание

БРАЙАН БАНДИ

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ. ВВОДНЫЙ КУРС

Заведующая редакцией О. В. Толкачева
Редактор М. Г. Коробочкина
Художественный редактор Т. В. Бусарова
Обложка художника В. В. Третьякова
Технический редактор Т. Н. Зыкина
Корректор Т. Л. Кускова

ИБ № 1644

Подписано в печать 5.10.87 Формат 60x88/16 Бумага офс. № 2 Гарнитура "Пресс-роман" Печать офсетная Усл. печ. л. 7,84 Усл. кр.-отт. 8.21 Уч.-изд. л. 8,67
Тираж 50 000 экз. Изд. № 22182 Зак. № 76[illegible] Цена 60 к.
Издательство "Радио и связь". 101000, Москва, Почтамт, а/я 693

Московская типография № 4 Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли.
129041, Москва, Б. Переяславская ул., д. 46