МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра вычислительной техники

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
__________ О.Г. Локтионова
«25» ________ 2022 г.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ: МЕТОДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОИЗВОДНЫХ И МИНИМИЗАЦИЯ МНОГОМОДАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Методические указания к лабораторным и практическим занятиям для
студентов направлений подготовки 09.03.01 и 09.04.01
Информатика и вычислительная техника

Курск 2022

УДК 534.1
Составитель Ж.Т. Жусубалиев

Рецензент
Кандидат технических наук, доцент *Т.Н. Конаныхина*

Численные методы одномерной минимизации: методы с использованием производных и минимизация многомодальных функций: методические указания к лабораторным и практическим занятиям для студентов направлений подготовки 09.03.01 и 09.04.01 Информатика и вычислительная техника/ Юго-Зап. гос. ун-т; сост. Ж.Т. Жусубалиев. – Курск, 2022. – 11 с.: ил.7. – Библиогр.: с. 11.

Описывается алгоритмы численного поиска минимума функции с использованием производных первого, второго порядков. Описан алгоритм минимизации многомодальных функций, называемый методом ломаных. Предназначены для студентов направлений подготовки 09.03.01, 09.04.01 очной и заочной форм обучения.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 2022. Формат $\mathbf{60 \times 84}\,{}^{1}/_{16}$.
Усл. печ. л. . Уч.-изд. л. . Тираж 50 экз. Заказ . Бесплатно.
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

1. Цель работы

Изучение численных методов одномерной минимизации с использованием производных первого, второго порядков, а также алгоритма минимизации многомодальных функций методом ломаных.

2. Постановка задачи

Если $f(x)$ унимодальная и непрерывной диффенцируемая функция на отрезке минимизации $[a;b]$, то точку минимума x_* можно вычислить как корень уравнения $f'(x) = 0$ с помощью методов численного решения нелинейных уравнений

3. Метод средней точки

Точку x_* минимума $f(x)$ вычисляют как корень уравнения

$$f'(x) = 0, \quad [a, b]$$

методом деления отрезка пополам.

Так как $f(x)$ унимодальная на отрезке $[a, b]$, то $f'(a) < 0$ и $f'(b) > 0$.

Алгоритм очень простой и включает следующие шаги.

- Шаг 1. Задать a, b, ε.
- Шаг 2. Вычислить среднюю точку $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$ и $f'(x_0)$.
- Шаг 3. Если $f'(x_0) < 0$, то положить $a = x_0$, иначе $b = x_0$.
- Шаг 4. Если $|a - b| < \varepsilon$, то закончить поиск, положив $x_* = x_0$. Иначе перейти к шагу 2.

4. Метод Ньютона и его модификации

4.1. Метод Ньютона-Рафсона

Метод основан на вычислении x_* корня уравнения

$$f'(x) = 0, \quad [a, b]$$

методом Ньютона-Рафсона:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, ..., \quad x_0 \in [a, b]. \tag{1}$$

Формулу можно получить и следующим образом.

Рассмотрим разложение функции $f(x)$ в ряд Тейлора в окрестности k-го приближнения

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)\,(x - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2}(x - x_k)^2 + O(x - x_k)^3.$$

Взяв три первых члена раздожения, запишем

$$\varphi_k(x) \approx f(x_k) + f'(x_k)\,(x - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2}(x - x_k)^2.$$

Функция $\varphi_k(x)$ есть квадратичный трехчлен, аппросимирующий $f(x)$ в малой окрестности x_k.

Найдем точку минимума функции $\varphi_k(x)$ из условия

$$\varphi_k'(x) = 0.$$

Если считать полученный корень уравнения $\varphi_k'(x) = 0$ следующим приближением x_{k+1} точки минимума исходной функции, то получим формулу (6.).

4.2. Гибридный алгоритм Ньютона-Рафсона

Метод Ньютона является локально q-квадратично сходящимся. Поэтому приходится затрачивать значительные вычислительные усилия на достижение достаточной близости текущего приближения к решению, чтобы метод Ньютона смог реализовать свою высокую скорость сходимости.

На практике применяются так называемые гибридные методы. Заметим, что термин «*гибридный*» или «*регуляризованный*» введен специалистами вычислительной математики [1], для алгоритмов, которые представляют собой комбинации надежных, но медленно сходящихся методов (глобально сходящихся) с недостаточно надежными, но быстро сходящимися методами (например, Ньютона-Рафсона). Такие алгоритмы обладают высокой надежностью и гарантированной сходимостью. [2]

В качестве глобальной стратегии можно применить такой прием.

[1] см. например, Powell, M.J.D. A Hybrid Method for Nonlinear Equations/M.J.D. Powell//Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations. – 1970. – 7. Pp. 87–114.
Dennis, J.E. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations/J.E. Dennis, R.B. Schnabel//New Jersey: Prentice-Hall, Inc.– 1983. – P. 395.

[2] Амосов, А.А. Вычислительные методы для инженеров: Учебное пособие/А.А. Амосов, Ю.А. Дубинский, Н.В. Копченова – М.: Высш. шк., 1994. – 544 с.

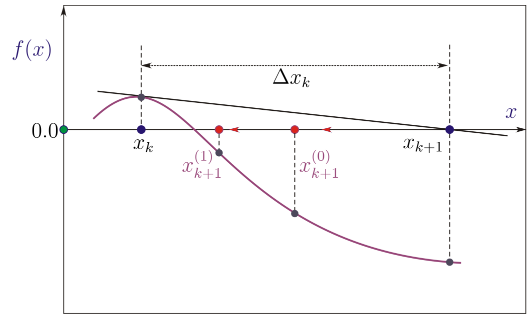


Рис. 1.

Если ньютоновская точка $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$ ($\Delta_k = -\dfrac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$) не приводит к уменьшению $|f'(x)|$, то разумная стратегия состоит в дроблении шага Δx_k с движением в обратном направлении x_{k+1} к x_k, пока не встретится точка $x_{k+1}^{(i)}$, $i = 0, 1, ...,$ для которой $|f'(x_{k+1}^{(i)})| < |f'(x_k)|$ (рис. 1).

Таким образом, на каждой итерации надо выполнить:

$$x_+ = x_- - \frac{f'(x_-)}{f''(x_-)};$$
$$\text{while} \quad |f'(x_+)| \geqslant |f'(x_-)| \quad \text{do}$$
$$x_+ \leftarrow \frac{x_+ + x_-}{2}.$$

4.3. Упрощенный метод Ньютона

В формуле метода Ньютона-Рафсона полагают $f''(x_k) = f''(x_0) = \text{const}$:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_0)}, \quad k = 0, 1, 2, ..., \quad x_0 \in [a, b].$$

4.4. Метод секущих

В методе Ньютона-Рафсона

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, ...,$$

используют конечно-разностную аппроксимацию второй производной: $f''(x_k) \approx \dfrac{f'(x_k) - f'(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$. Тогда расчетная формула:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f'(x_k) - f'(x_{k-1})} f'(x_k), \quad k = 1, 2, ..., \quad x_0 \in [a, b]$$

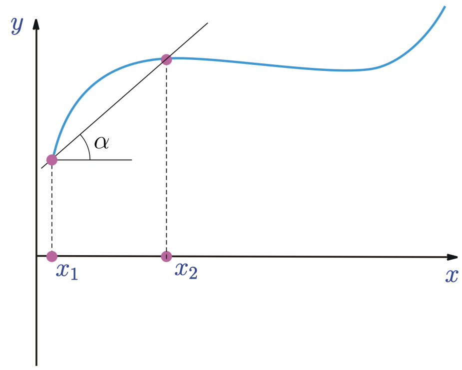


Рис. 2.

или

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - y_k}{f'(x_k) - f'(y_k)} f'(x_k),$$

$$y_{k+1} = x_k,$$

$$k = 0, 1, 2, ..., \quad x_0 \in [a, b]$$

5. Минимизация многомодальных функций: метод ломаных

Метод рассчитан на минимизацию многомодальных функций, удовлетворяющих условию Липшица.

Функция $f(x)$ удовлетворяет *условию Липшица* на отрезке $[a, b]$, если существует число $L > 0$ такое, что

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leqslant L|x_1 - x_2| \quad \text{при всех} \quad x_1, x_2 \in [a, b].$$

Число L называется *постоянной Липшица.*

Геометрический смысл условия Липшица — модуль углового коэффициента любой хорды графика функции $f(x)$ не превосходит L: $|tg\,\alpha| \leqslant L$ (рис. 2).

Достаточное условие существования постоянной Липшица.

Если $f(x)$ имеет на отрезке $[a, b]$ непрерывную производную и для этой производной $\max_{[a,b]} |f'(x)| \leqslant L$, то L — постоянная Липшица.

В методе ломаных используются кусочно-линейные аппроксимации функции $f(x)$, графиками которых являются ломаные.

Пусть $f(x)$ удовлетворяет на $[a, b]$ условию Липшица с константой L. Выберем точку $x_0 \in [a, b]$ построим функцию

$$g(x, x_0) = f(x_0) - L|x_0 - x|.$$

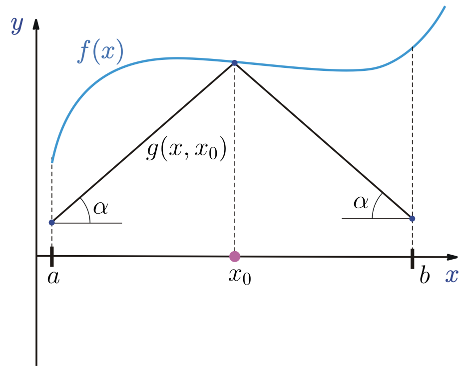


Рис. 3.

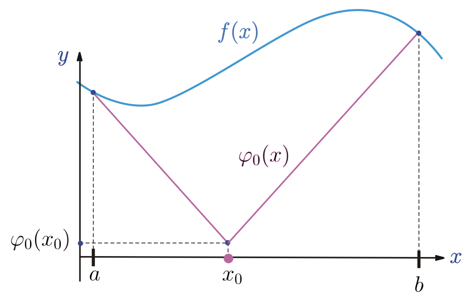


Рис. 4.

Функция $g(x_0, x)$ имеет максимум в точке $x = x_0$ и минимальна на концах отрезка $[a, b]$ (рис. 3).

Аппроксимирующие кусочно-линейные функции строятся следующим образом.

- **Шаг 1:** Рассмотрим прямые $y = f(a) - L(x - a), \quad y = f(b) + L(x - b)$. Графики функций пересекаются в точке (x_0, y_0) с координатами

$$x_0 = \frac{1}{2L}[f(a) - f(b) + L(a + b)], \quad y_0 = \frac{1}{2}[f(a) + f(b) + L(a - b)].$$

Определим кусочно-линейную функцию $\varphi_0(x)$:

$$\varphi_0(x) = \begin{cases} f(a) - L(x - a), & a \leqslant x < x_0, \\ f(b) + L(x - b), & x_0 \leqslant x \leqslant b. \end{cases}$$

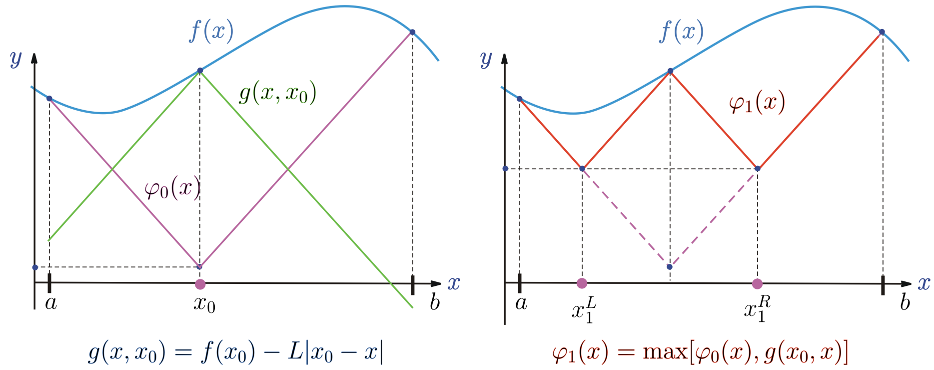
Точкой минимума $\varphi_0(x)$ является $x = x_0$ (рис. 4).

- **Шаг 2:** Построим вспомогательную функцию

$$g(x, x_0) = f(x_0) - L|x_0 - x|$$

и произведем «исправление» ломаной $\varphi_0(x)$ путем построения новой аппроксимирующей кусочно-линейной функции (рис. 5) :

$$\varphi_1(x) = \max[\varphi_0(x), g(x_0, x)]$$



(а) (б)

Рис. 5.

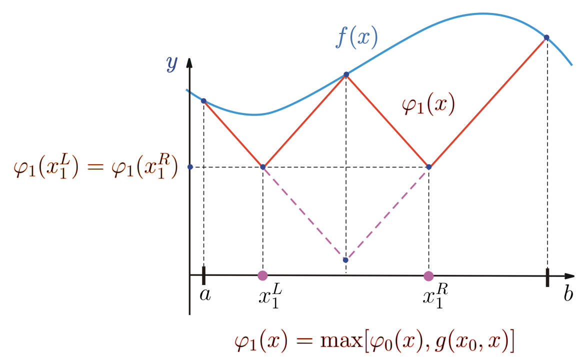


Рис. 6.

Это приводит к появлению двух новых «нижних» вершин: новая аппроксимирующая функция $\varphi_1(x)$ по сравнению с $\varphi_0(x)$ имеет две точки минимума:

$$x_1^L = x_0 - \Delta_1, \quad x_1^R = x_0 + \Delta_1, \quad \text{где} \quad \Delta_1 = \frac{1}{2L}[f(x_0) - \varphi_0(x_0)],$$
$$\varphi_1(x_1^L) = \varphi_1(x_1^R) = \frac{1}{2}[f(x_0) + \varphi_0(x_0)],$$

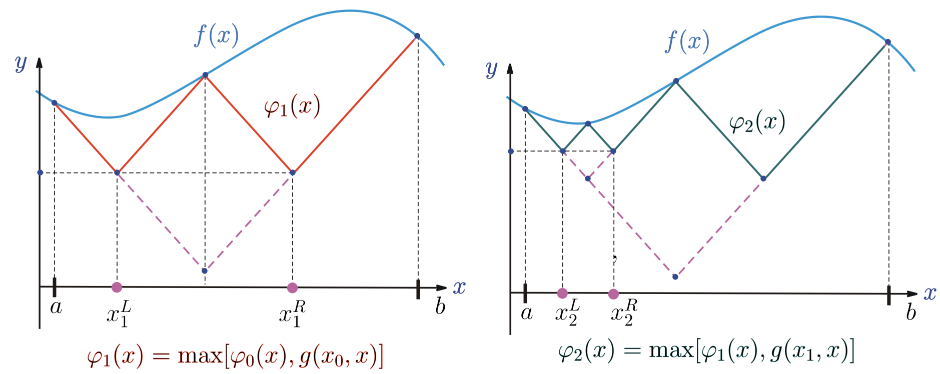
Из двух точек x_1^L, x_1^R минимума $\varphi_1(x)$ за точку x_1 глобального минимума берется та, в которой $f(x)$ принимает меньшее значение. Так, если $f(x_1^L) > f(x_1^R)$, то $x_1 = x_1^L$, иначе $x_1 = x_1^R$ (рис. 6).

Обозначим ее x_1. Построим вспомогательную функцию

$$g(x, x_1) = f(x_1) - L|x_1 - x|$$

и новую аппроксимирующую кусочно-линейную функцию $\varphi_2(x)$:

$$\varphi_2(x) = \max[\varphi_1(x), g(x_1, x)]$$



(а) (б)

Рис. 7.

У функции $\varphi_2(x)$ по сравнению с $\varphi_1(x)$ появились две новые точки минимума (рис. 7) , которые находятся аналогично:

$$x_2^L = x_1 - \Delta_2, \quad x_2^R = x_1 + \Delta_2, \quad \text{где} \quad \Delta_2 = \frac{1}{2L}[f(x_1) - \varphi_1(x_1)],$$

$$\varphi_2(x_2^L) = \varphi_2(x_2^R) = \frac{1}{2}[f(x_1) + \varphi_1(x_1)].$$

Из двух точек x_2^L, x_2^R минимума $\varphi_2(x)$ за следующую точку глобального минимума x_2 берется та, в которой $f(x)$ принимает меньшее значение.

- **Шаг k:** Пусть известны точки $x_0, x_1, x_2, ..., x_k$. Построим вспомогательную функцию

$$g(x, x_k) = f(x_k) - L|x_k - x|$$

и аппроксимирующую кусочно-линейную функцию $\varphi_{k+1}(x)$:

$$\varphi_{k+1}(x) = \max[\varphi_k(x), g(x_k, x)]$$

Найдем минимум $\varphi_{k+1}(x)$.

В результате получим последовательность функций $\varphi_k(x)$, $k = 0, 1, 2, ...$, такую, что

$$\varphi_k(x) \leqslant \varphi_{k+1}(x) \leqslant f(x).$$

С ростом k полученная ломаная сколь угодно близко приближает график функции $f(x)$. При этом x_k стремится к точке глобального минимума $f(x)$.

Условие окончания поиска:

$$\delta_k = 2L\Delta_k < \varepsilon.$$

5.1. Алгоритм

- **Шаг 1.** Задать $[a, b]$, L, ε.
- **Шаг 2.** Вычислить

  $$x_0 = \frac{1}{2L}[f(a) - f(b) + L(a+b)], \quad y_0 = \frac{1}{2}[f(a) + f(b) + L(a-b)],$$

  $\varphi_{min} \leftarrow y_0$.

- **Шаг 3.**

  $$\Delta = \frac{1}{2L}[f(x_0) - \varphi_{min}]$$

- **Шаг 4.** Если $2L\Delta < \varepsilon$, то $x_{min} \leftarrow x_0$ и закончить поиск. Иначе, перейти к шагу 5.
- **Шаг 5.**

  $$x_1^L = x_0 - \Delta, \quad x_1^R = x_0 + \Delta, \quad \varphi \leftarrow \frac{1}{2}[f(x_0) + \varphi_{min}),$$

- **Шаг 6.**

  Если $f(x_1^L) < f(x_1^R)$, то $x_0 \leftarrow x_1^L$. Иначе $x_0 \leftarrow x_1^R$.

  $\varphi_{min} \leftarrow \varphi$.

  Перейти к **шагу 3.**

6. Задания к лабораторным и практическим занятиям

- 1. Реализовать метод Ньютона-Рафсона, гибридный алгоритм, метод средней точки, метод хорд на тестовой задаче

  $$f(x) = 2x^2 + 4x, \quad -2.0 < x < 0, \quad a = -2.0, \quad b = 0.0, \quad \varepsilon = 10^{-10}.$$

  Предварительно постройте график функции.

- 2. Минимизируйте функцию

$$f(x) = x\arctan(x) - \frac{1}{2}\ln(1+x^2)$$

на отрезке $[-6, 6]$ методом Ньютона-Рафсона, гибридным алгоритмом, методом средней точки, методом секущих. Выбирая различные начальные приближения. Найдите какое-либо значение x_0, при котором метод Ньютона-Рафсона начнет расходиться.

- 3. Минимизируйте функции

$$f(x) = (x^4 - 1) \quad \text{на отрезке} \quad [0.5; 2];$$
$$f(x) = x\sin(1/x) \quad \text{на отрезке} \quad [0.2; 1]$$

методом Ньютона-Рафсона, гибридным алгоритмом, методом средней точки, упрощенным методом Ньютона, методом секущих. Сравните эти методы. Решения задач проиллострируйте графически.

- 4. Минимизируйте функции

$$f(x) = \frac{\cos\ 10x}{\mathrm{e}^x} \quad \text{на отрезке} \quad [1; 5];$$
$$f(x) = 0.1x + 2\ \sin\ 4x \quad \text{на отрезке} \quad [0; 4]$$

методом методом ломаных. Решения задач проиллострируйте графически.

Библиографический список

1. *Аттетков, А. В.* Введение в методы оптимизации [Текст]: учебное пособие / А. В. Аттетков, В. С. Зарубин, А. Н. Канатников. - М. : Финансы и статистика, 2008. - 272 с.

2. *Гончаров, В. А.* Методы оптимизации [Текст] : учебное пособие / В. А. Гончаров. - М. : Юрайт, 2010. - 191 с.

3. *Пантелеев, А. В.* Методы оптимизации в примерах и задачах [Текст] : учебное пособие / А. В. Пантелеев, Т. А. Летова. - 2-е изд., испр. - М. : Высшая школа, 2005. - 544 с.