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» 0[illegible] 2022 г.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ БЕЗУСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ МЕТОДАМИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

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*

Численное решение задач безусловной минимизации методами второго порядка: 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. – 7 с.: – Библиогр.: с. 7.

Описывается численные методы безусловной многомерной минимизации методами второго порядка. Описаны алгоритмы методов Ньютона и Ньютона - Рафсона. 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 **60 × 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 многомерной безусловной минимизации методами второго порядка – алгоритмов методов Ньютона и Ньютона - Рафсона.

2. Постановка задачи

Пусть дана функция многих переменных $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, которая имеет напрерывные частные производные во всех его точках.

Требуется найти локальный минимум функции $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$, т.е. такую точку $\boldsymbol{x}_* \in \mathbb{R}^n$, в которой она принимает минимальное значение

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

3. Метод Ньютона

Идея метода Ньютона, как и методов первого порядка, состоит в построении последовательности приближений $\boldsymbol{x}^{(0)}$, $\boldsymbol{x}^{(1)}$, $\boldsymbol{x}^{(3)}$, ... точки $\boldsymbol{x}_*$, таких что $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{k+1}) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$, $k = 0, 1, 2, ...$ (т.е. в выполняется условие убывания).

Такая последовательность вычисляется

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \, \boldsymbol{p}^{(k)}, \quad , k = 0, 1, 2, ..., \tag{1}$$

где направление спуска $\boldsymbol{p}^{(k)}$ определяется по формуле

$$\boldsymbol{p}^{(k)} = -\boldsymbol{G}^{-1} \left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k). \tag{2}$$

Здесь $\boldsymbol{G}^{-1} \left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right)$ – матрица Гессе. Если $\boldsymbol{G}^{-1} \left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) > 0$ (положительно-определена), то $\boldsymbol{p}^{(k)}$, выбранное таким образом, гарантирует условие убывания функции $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{k+1}) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$.

Формула получена из следующих соображений:

1. Минимизируемая функция $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ аппроксимируется в каждой точке последовательности $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ квадратичной функцией

$$\Phi_k(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k) + \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)^T \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}) + \frac{1}{2} \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})^T \cdot \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}). \tag{3}$$

2. Находим минимум этой функции из условия $\nabla \Phi_k(\boldsymbol{x}) = 0$:

$$\nabla \Phi_k(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k) = 0. \tag{4}$$

Пусть матрица $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{(k)})$ положительно-определена, следовательно невырождена. Тогда существует обратная матрица $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)})$, так что функция $\Phi_k(\boldsymbol{x}^k)$ имеет единственную точку глобального минимума.

Решив уравнение (4) относительно $\boldsymbol{x}$, найдем точку минимума квадратичной функции $\Phi_k(\boldsymbol{x})$.

Примем эту точку за следующее приближение $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ точки минимума функции $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k), \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{5}$$

Алгоритм включает следующие шаги

- Шаг 1. Задать $\boldsymbol{x}^{(0)}$, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$ и m и найти найти градиент функции м матрицу Гессе в произвольной точке.
- Шаг 2. Положить $k = 0$.
- Шаг 3. Вычислить $\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.
- Шаг 4. Проверить условие останова $||\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)|| < \varepsilon_1$:

  (а) если условие выполняется, то $\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}^{(k)}$;

  (б) если нет, то перейти к шагу 5.
- Шаг 5. Проверить условие $k > m$:

  (а) если условие выполняется, то мы говорим, что принудительно завершаем работу алгоритма (вопрос, насколько близко $\boldsymbol{x}^{(k)}$ к $\boldsymbol{x}_*$, требует дополнительного исследования);

  (б) если нет, то перейти к шагу 6.
- Шаг 6. Вычислить матрицу $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.
- Шаг 7. Вычислить матрицу $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.
- Шаг 8. Проверить условие $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) > 0$:

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

  (б) если нет, то перейти к шагу 10, положив $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}^k) = \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$.
- Шаг 9. Вычислить

  $$\boldsymbol{p}^{(k)}(\boldsymbol{x}^{(k)}) = -\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k).$$

- Шаг 10. Найти

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\, \boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}^k),$$

положив $\alpha_k = 1$, если $\boldsymbol{p}^{(k)}(\boldsymbol{x}^{(k)}) = -\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$ или выбрать α_k из условия $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{k+1}) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$.

- Шаг 11. Проверить выполнение условий $||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{k+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)|| < \varepsilon_2$ и $||\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k|| < \varepsilon_2$:

  (а) если условия выполняются то $\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}^{(k+1)}$ и закончить поиск.

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

4. Метод Ньютона - Рафсона

Постановка задачи такая же, как и для метода Ньютона. Поэтому не будем ее повторять, а сразу же перейдем к решению задачи.

Последовательность $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$, $k = 0, 1, 2, ...$ приближений к точке минимума $\boldsymbol{x}_*$ вычисляется

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha_k\, \boldsymbol{G}^{-1}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k), \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{6}$$

Шаг α_k рассчитывается для каждого шага k из условия

$$\alpha_k = \min_{\alpha > 0} \varphi_k(\alpha), \quad \varphi_k(\alpha) = \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha \boldsymbol{G}^{-1}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)\right).$$

Алгоритм

- Шаг 1. Задать $\boldsymbol{x}^{(0)}$, $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$ и m и найти найти градиент функции им матрицу Гессе в произвольной точке.

- Шаг 2. Положить $k = 0$.

- Шаг 3. Вычислить $\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.

- Шаг 4. Проверить условие останова $||\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)|| < \varepsilon_1$:

  (а) если условие выполняется, то $\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}^{(k)}$;

  (б) если нет, то перейти к шагу 5.

- Шаг 5. Проверить условие $k > m$:

  (а) если условие выполняется, то мы говорим, что принудительно завершаем работу алгоритма (вопрос, насколько близко $\boldsymbol{x}^{(k)}$ к $\boldsymbol{x}_*$, требует дополнительного исследования);

  (б) если нет, то перейти к шагу 6.

- Шаг 6. Вычислить матрицу $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.

- Шаг 7. Вычислить матрицу $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)})$.

- Шаг 8. Проверить условие $\boldsymbol{G}^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) > 0$:

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

  (б) если нет, то перейти к шагу 10, положив $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}^k) = \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)$.

- Шаг 9. Вычислить шаг α_k

$$\alpha_k = \min_{\alpha > 0} \varphi_k(\alpha), \quad \varphi_k(\alpha) = \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha \boldsymbol{G}^{-1}\left(\boldsymbol{x}^{(k)}\right) \cdot \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)\right).$$

- Шаг 10. Найти

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\, \boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}^k).$$

- Шаг 11. Проверить выполнение условий $||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{k+1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^k)|| < \varepsilon_2$ и $||\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k|| < \varepsilon_2$:

  (а) если условия выполняются то $\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}^{(k+1)}$ и закончить поиск;

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

Задания к лабораторным и практическим занятиям

1. Решить численно задачу мнимизации квадратичной функции

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} - \mathbf{b}^T \boldsymbol{x}$$

методами Ньютона и Ньютона -Рафсона. За сколько итераций сходится каждый из методов?

Здесь

$$A = \begin{bmatrix} N & -N \\ -N & N+1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3N-1 \\ 5N+3 \end{bmatrix}.$$

Параметр N равен номеру студента в списке группы.

2. Найти минимум функции Розенброка

$$f(\boldsymbol{x}) = 100(x_1^2 - x_2^2)^2 + (x_1 - 1)^2, \boldsymbol{x}^{(0)} = (-1, 1)^T.$$

методами Ньютона и Ньютона - Рафсона.

3. Найти максимум функции

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(x_1+1)^2 + x_2^2}, \quad \boldsymbol{x}^{(0)} = (-1, 1)^T.$$

методами Ньютона и Ньютона - Рафсона.

4. Найти минимум функций

$$f(\boldsymbol{x}) = 4(x_1 - 5)^2 + (x_2 - 6)^2, \quad \boldsymbol{x}^{(0)} = (8, 9)^T;$$
$$f(\boldsymbol{x}) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2, \quad \boldsymbol{x}^{(0)} = (0, 0)^T;$$

методами Ньютона и Ньютона - Рафсона.

Библиографический список

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

2. *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.

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

4. *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.