СОВРЕМЕННОЕ БИЗНЕС-ОБРАЗОВАНИЕ

А.В. ПАНТЕЛЕЕВ

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ПО КУРСУ «ТЕОРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Печатается по рекомендации
Редакционного совета факультета
«Прикладная математики и физика»
Московского авиационного института
(*национального исследовательского университета*)

МОСКВА

ДОБРОЕ СЛОВО

2012

УДК 519.8
ББК 22.161.5
П16

Пантелеев А.В. Учебно-методический комплекс по курсу «Теория оптимизации и численные методы»: учеб. пособ. – М.: Доброе слово, 2012. – 260 с.: ил. – (Современное бизнес-образование).

ISBN 978-5-89796-413-0

Приведены конспекты лекций, материалы для практических занятий, типовые задания для самостоятельной работы студентов по курсу «Теория оптимизации и численные методы».

Пособие предназначено для студентов экономических специальностей вузов очной, заочной и дистанционной форм обучения.

Пантелеев Андрей Владимирович

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ПО КУРСУ «ТЕОРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Учебное издание

ОГЛАВЛЕНИЕ

ЛЕКЦИИ

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

ЛЕКЦИИ

Лекция 1

Раздел I. ТЕОРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ

1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ И ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Постановка задачи поиска минимума функций содержит:

- *целевую функцию* $f(x)$, где $x = (x_1, ..., x_n)^T$, определенную на n-мерном евклидовом пространстве R^n. Ее значения характеризуют степень достижения цели, во имя которой поставлена или решается задача;
- *множество допустимых решений* $X \subseteq R^n$, среди элементов которого осуществляется поиск.

Требуется найти такой вектор x^* из множества допустимых решений, которому соответствует минимальное значение целевой функции на этом множестве:

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x). \tag{1.1}$$

З а м е ч а н и я.

1. Задача поиска максимума функции $f(x)$ сводится к задаче поиска минимума путем замены знака перед функцией на противоположный (рис. 1):

$$f(x^*) = \max_{x \in X} f(x) = -\min_{x \in X} \left[-f(x)\right].$$

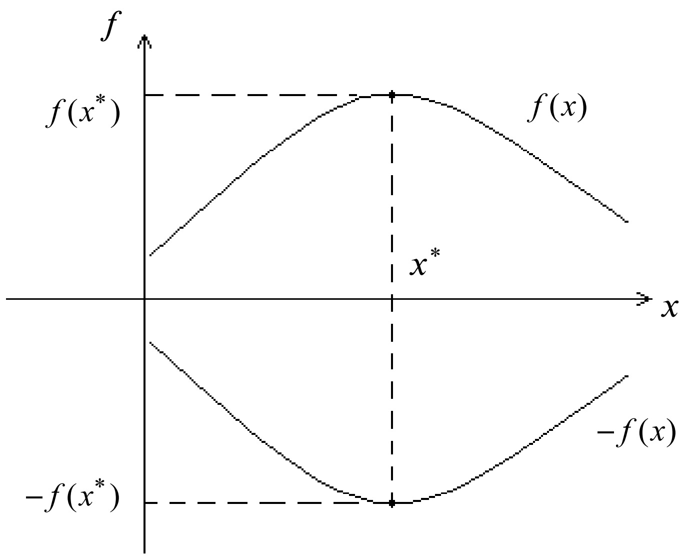


Рис. 1

2. Задача поиска минимума и максимума целевой функции $f(x)$ называется задачей поиска *экстремума*: $f(x^*) = \underset{x \in X}{\operatorname{extr}} f(x)$.

3. Если множество допустимых решений X задается ограничениями (условиями), накладываемыми на вектор x , то решается задача поиска *условного экстремума*. Если $X = R^n$, т.е. ограничения (условия) на вектор x отсутствуют, решается задача поиска *безусловного экстремума*.

4. Решением задачи поиска экстремума является пара $(x^*, f(x^*))$, включающая точку x^* и значение целевой функции в ней.

5. Множество точек минимума (максимума) целевой функции $f(x)$ на множестве X обозначим X^* . Оно может содержать конечное число точек (в том числе одну), бесконечное число точек или быть пустым.

Определение 1.1. Точка $x^* \in X$ называется точкой *глобального* (*абсолютного*) *минимума* функции $f(x)$ на множестве X , если функция достигает в этой точке своего наименьшего значения, т.е.

$$f(x^*) \le f(x) \quad \forall x \in X .$$

Определение 1.2. Точка $x^* \in X$ называется точкой *локального* (*относительного*) *минимума* функции $f(x)$ на множестве допустимых решений X , если существует $\varepsilon > 0$, такое, что если $x \in X$ и $\|x - x^*\| < \varepsilon$, то $f(x^*) \le f(x)$. Здесь $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2}$ – евклидова норма вектора x .

З а м е ч а н и я.

1. В определении 1.1 точка x^* сравнивается по величине функции со всеми точками из множества допустимых решений X , а в определении 1.2 – только с принадлежащими ее ε -окрестности (рис. 2).

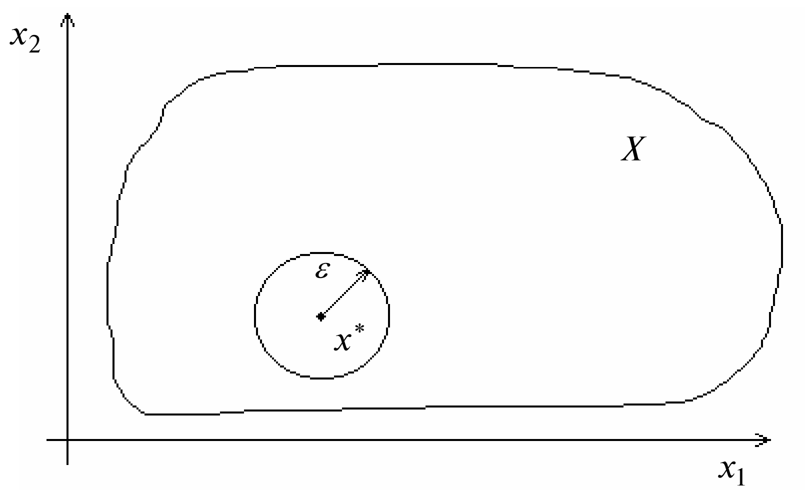


Рис. 2

2. Если в определениях 1.1 и 1.2 знак неравенства $\le$ заменить на $\ge$, то получим определения *глобального* (*абсолютного*) и *локального* (*относительного*) *максимумов*.

3. Глобальный экстремум всегда является одновременно локальным, но не наоборот.

Определение 1.3. *Поверхностью уровня* функции $f(x)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянное значение, т.е. $f(x) = \text{const}$. Если $n = 2$, поверхность уровня изображается *линией уровня* на плоскости R^2.

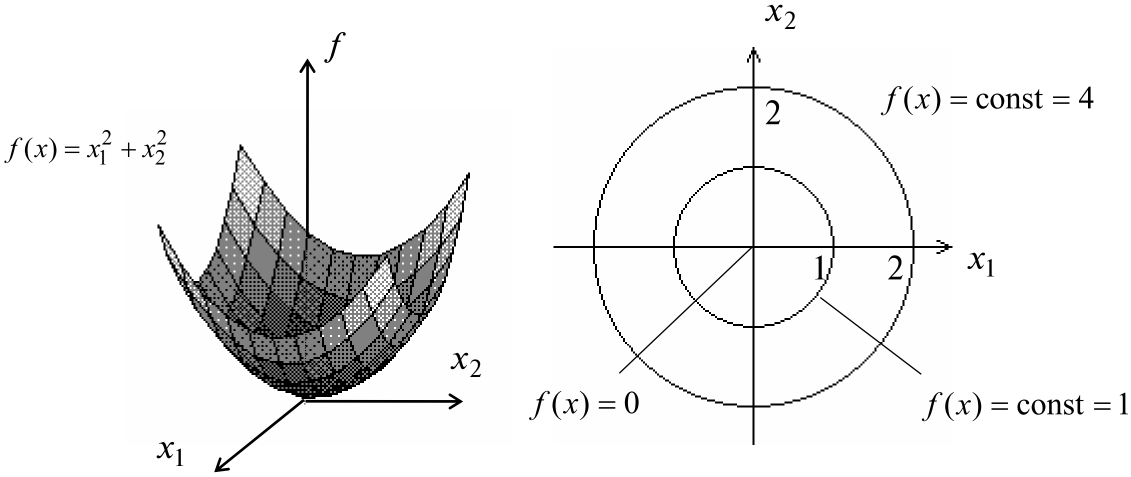
Пример. Построить линии уровня функций:

а) $f(x) = x_1^2 + x_2^2$; б) $f(x) = \dfrac{x_1^2}{4} + x_2^2$;

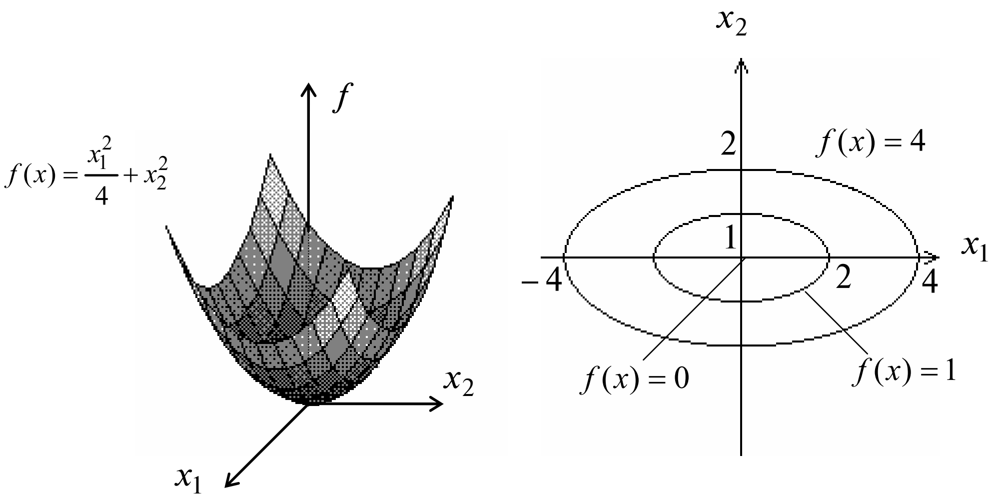
☐ Уравнения линий уровня имеют следующий вид:

а) $f(x) = x_1^2 + x_2^2 = \text{const} = r^2$ – уравнение окружностей с центром в точке $(0,0)^T$ и радиусом, равным *r* (рис. 3, *а*);

б) $f(x) = \dfrac{x_1^2}{4} + x_2^2 = \text{const}$ – уравнение эллипса. Если $\text{const} = 1$, то $a = 2$ и $b = 1$ – большая и малая полуоси (рис. 3, *б*) . ■



а)



б)

Рис. 3

Определение 1.4. *Градиентом* $\nabla f(x)$ непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ в точке x называется вектор-столбец, элементами которого являются частные производные первого порядка, вычисленные в данной точке:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Градиент функции направлен по нормали к поверхности уровня (см. определение 1.3), т.е. перпендикулярно к касательной плоскости, проведенной в точке x , в сторону наибольшего возрастания функции в данной точке.

Определение 1.5. *Матрицей Гессе* $H(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой в точке x функции $f(x)$ называется матрица частных производных второго порядка, вычисленных в данной точке:

$$H(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nn} \end{pmatrix},$$

где $h_{ij} = \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \, \partial x_j}$, $i, j = 1, \ldots, n$.

Замечания.

1. Матрица Гессе является симметрической размеров $(n \times n)$.

2. Вместе с градиентом можно определить вектор *антиградиента*, равный по модулю вектору градиента, но противоположный по направлению. Он указывает в сторону наибольшего убывания функции в данной точке.

3. С помощью градиента и матрицы Гессе, используя разложение в ряд Тейлора, приращение функции $f(x)$ в точке x может быть записано в форме

$$\Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = \nabla f(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H(x) \Delta x + o\left(\|\Delta x\|^2\right), \qquad (1.2)$$

где $o(\|\Delta x\|^2)$ – сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго; $\Delta x^T H(x) \Delta x$ – квадратичная форма.

Пример. Для функции $f(x) = x_1^2 + x_2^4$ вычислить градиент и найти матрицу Гессе в точках $x^0 = (0,0)^T$, $x^1 = (1,1)^T$.

□ Согласно определениям 1.4 и 1.5 имеем:

$$\nabla f(x) = \left(2x_1,\, 4x_2^3\right)^T, H(x) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12x_2^2 \end{pmatrix}; \quad \nabla f(x^0) = (0,\, 0)^T, H(x^0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\nabla f(x^1) = (2,\, 4)^T, H(x^1) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12 \end{pmatrix}. \ \blacksquare$$

Определение 1.6. Квадратичная форма $\Delta x^T H(x) \Delta x$ (а также соответствующая матрица Гессе $H(x)$) называется:

- *положительно определенной* $(H(x) > 0)$, если для любого ненулевого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x > 0$;
- *отрицательно определенной* $(H(x) < 0)$, если для любого ненулевого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x < 0$;
- *положительно полуопределенной* $(H(x) \ge 0)$, если для любого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x \ge 0$ и имеется отличный от нуля вектор Δx, для которого $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$;
- *отрицательно полуопределенной* $(H(x) \le 0)$, если для любого Δx выполняется неравенство $\Delta x^T H(x) \Delta x \le 0$ и имеется отличный от нуля вектор Δx, для которого $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$;
- *неопределенной* ($H(x) \gtrless 0$) , если существуют такие векторы Δx, $\Delta \tilde{x}$, что выполняются неравенства $\Delta x^T H(x) \Delta x > 0$, $\Delta \tilde{x}^T H(x) \Delta \tilde{x} < 0$;
- *тождественно равной нулю* $(H(x) \equiv 0)$, если для любого Δx выполняется равенство $\Delta x^T H(x) \Delta x = 0$.

2. НЕОБХОДИМЫЕ И ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Постановка задачи

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

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

$$f(x^*) = \min_{x \in R^n} f(x); \qquad f(x^*) = \max_{x \in R^n} f(x). \tag{2.1}$$

Стратегия решения задачи

Находятся точки x^* локальных экстремумов с помощью необходимых условий первого и второго порядка (порядок условий определяется порядком используемых производных), а также достаточных условий безусловного локального экстремума. Вычисляются значения $f(x^*)$ функции в найденных точках локальных экстремумов.

Утверждение 2.1 (необходимые условия экстремума первого порядка).

Пусть $x^* \in R^n$ *есть точка локального минимума (максимума) функции* $f(x)$ *на множестве* R^n *и* $f(x)$ *дифференцируема в точке* x^*. *Тогда градиент функции* $f(x)$ *в точке* x^* *равен нулю, т.е.*

$$\nabla f(x^*) = 0 \tag{2.2}$$

или

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1,\dots,n. \tag{2.3}$$

Определение 2.1. Точки x^*, удовлетворяющие условию (2.2) или (2.3), называются *стационарными.*

Утверждение 2.2 (необходимые условия экстремума второго порядка).

Пусть точка x^* *есть точка локального минимума (максимума) функции* $f(x)$ *на множестве* R^n *и функция* $f(x)$ *дважды дифференцируема в этой точке. Тогда матрица Гессе* $H(x^*)$ *функции* $f(x)$, *вычисленная в точке* x^*, *является положительно полуопределенной (отрицательно полуопределенной), т.е.*

$$H(x^*) \ge 0, \tag{2.4}$$

$$(H(x^*) \le 0). \tag{2.5}$$

Утверждение 2.3 (достаточные условия экстремума).

Пусть функция $f(x)$ *в точке* $x^* \in R^n$ *дважды дифференцируема, ее градиент равен нулю, а матрица Гессе является положительно определенной (отрицательно определенной), т.е.*

$$\nabla f(x^*) = 0 \;\text{ и }\; H(x^*) > 0, \tag{2.6}$$

$$(H(x^*) < 0). \tag{2.7}$$

Тогда точка x^* *есть точка локального минимума (максимума) функции* $f(x)$ *на множестве* R^n.

Определение 2.2. Рассмотрим определитель матрицы Гессе $H(x^*)$, вычисленной в стационарной точке

$$\det H(x^*) = \begin{vmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nn} \end{vmatrix}.$$

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

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

Для проверки выполнения достаточных условий экстремума и необходимых условий второго порядка используются два способа.

Первый способ (с помощью угловых и главных миноров – табл. 1).

- **Критерий проверки достаточных условий экстремума** (критерий Сильвестра).

Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была положительно определенной ($H(x^*) > 0$) и точка x^* являлась точкой локального минимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки угловых миноров были строго положительны:

$$\Delta_1 > 0, \quad \Delta_2 > 0, \ldots, \quad \Delta_n > 0. \tag{2.8}$$

Для того чтобы матрица Гессе $H(x^*)$ была отрицательно определенной ($H(x^*) < 0$) и точка x^* являлась точкой локального максимума, необходимо и достаточно, чтобы знаки угловых миноров чередовались, начиная с отрицательного:

$$\Delta_1 < 0, \; \Delta_2 > 0, \; \Delta_3 < 0, \ldots, \; (-1)^n \Delta_n > 0. \tag{2.9}$$

- **Критерий проверки необходимых условий экстремума второго порядка.**

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

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

Таблица 1

№ п/п	$\nabla f(x^*)$	$H(x^*)$	Первый способ	Тип стационарной точки x^*
1	0	>0	$\Delta_1>0, \Delta_2>0, ..., \Delta_n>0$	Локальный минимум
2	0	<0	$\Delta_1<0, \Delta_2>0, ..., (-1)^n \Delta_n>0$	Локальный максимум
3	0	≥ 0	Все главные миноры определителя матрицы $H(x^*)$ неотрицательны	Может быть локальный минимум, требуется дополнительное исследование
4	0	≤ 0	Все главные миноры четного порядка неотрицательны, а нечетного порядка неположительны	Может быть локальный максимум, требуется дополнительное исследование
5	0	$=0$	Матрица Гессе состоит из нулевых элементов	Требуется дополнительное исследование
6	0	$\gtrless 0$	Не выполняются условия п. 1–5	Нет экстремума

Второй способ (с помощью собственных значений матрицы Гессе – табл. 2).

Определение 2.3. *Собственные значения* λ_i, $i=1,...,n$, матрицы $H(x^*)$ размеров $(n \times n)$ находятся как корни характеристического уравнения (алгебраического уравнения n-й степени):

$$\left| H(x^*)-\lambda E \right| = \begin{vmatrix} h_{11}-\lambda & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22}-\lambda & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \dots & h_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0. \tag{2.10}$$

З а м е ч а н и е. Собственные значения вещественной симметрической матрицы $H(x^*)$ вещественные.

Таблица 2

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

Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Записать необходимые условия экстремума первого порядка в виде (2.3) и найти стационарные точки x^* в результате решения системы n в общем случае нелинейных алгебраических уравнений с n неизвестными. Для численного решения системы могут использоваться методы простой итерации, Зейделя, Ньютона.

Шаг 2. В найденных стационарных точках x^* проверить выполнение достаточных, а если они не выполняются, то необходимых условий второго порядка с помощью одного из двух способов (см. табл. 1 и 2).

Шаг 3. Вычислить значения $f(x^*)$ в точках экстремума.

Описанный алгоритм отображен на рис. 1, где показана последовательность действий в случаях выполнения и невыполнения соответствующих условий экстремума при применении первого способа.

Замечания.

1. Продолжение исследований, которое требуется в ряде случаев, разобранных в табл. 1 и 2, при решении практических задач, как правило, не проводится, за исключением небольшого числа модельных примеров.

2. Часто на практике, особенно при применении численных методов поиска экстремума, рассматриваемых в последующих разделах, требуется проверить, выполняются ли необходимые и достаточные условия экстремума в некоторой точке. Такой анализ необходим, так как многие численные методы позволяют найти лишь стационарную точку, тип которой требует уточнения.

Рис. 1

Лекция 2

3. НЕОБХОДИМЫЕ И ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ УСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Общая постановка задачи и основные положения изложены в разд. 1. Здесь мы рассмотрим случаи, когда множество допустимых решений X задается равенствами и неравенствами, т.е.

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x)\,; \quad f(x^*) = \max_{x \in X} f(x)\,, \tag{3.1}$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; \begin{array}{l} g_j(x) = 0,\ j = 1,\dots,m;\ \ m < n \\ g_j(x) \le 0,\ j = m+1,\dots,p \end{array} \right\}$, m и p – числа; $f(x)$ – целевая функция, $g_j(x), j = 1,\dots,p$, – функции, задающие ограничения (условия).

Будем считать функции $f(x)$; $g_j(x), j = 1,\dots,p$, дважды непрерывно дифференцируемыми на множестве R^n, а функции $g_j(x)$, задающие ограничения, – называть для краткости просто ограничениями. При $p = m$ задача (3.1) со *смешанными ограничениями* преобразуется в задачу с *ограничениями типа равенств*, а при $m = 0$ в задачу с *ограничениями типа неравенств*.

Определение 3.1. Функция

$$L(x, \lambda_0, \lambda) = \lambda_0 f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j g_j(x) \tag{3.2}$$

называется *обобщенной функцией Лагранжа*, числа $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_p$ – *множителями Лагранжа*, $\lambda = \left(\lambda_1, \dots, \lambda_p\right)^T$. *Классической функцией Лагранжа* называется функция

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j g_j(x)\,. \tag{3.3}$$

Определение 3.2. *Градиентом обобщенной* (*классической*) *функции Лагранжа по* x называется вектор-столбец, составленный из ее частных производных первого порядка по x_i, $i = 1,\dots,n$:

$$\nabla_x L(x, \lambda_0, \lambda) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial L(x, \lambda_0, \lambda)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial L(x, \lambda_0, \lambda)}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \tag{3.4}$$

$$\left[\nabla_x L(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \right].$$

Определение 3.3. *Вторым дифференциалом обобщенной* (*классической*) *функции Лагранжа* $L(x,\lambda_0,\lambda)$ $\left[L(x,\lambda)\right]$ называется функция

$$d^2L(x,\lambda_0,\lambda)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 L(x,\lambda_0,\lambda)}{\partial x_i\,\partial x_j}dx_i\,dx_j\,, \tag{3.5}$$

$$\left[d^2L(x,\lambda)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2 L(x,\lambda)}{\partial x_i\,\partial x_j}dx_i\,dx_j\right].$$

Определение 3.4. *Первым дифференциалом ограничения* $g_j(x)$ называется функция

$$dg_j(x)=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial g_j(x)}{\partial x_i}\,dx_i, \qquad j=1,\ldots,p\,. \tag{3.6}$$

Определение 3.5. Ограничение $g_j(x)\le 0$ называется *активным* в точке x^*, если $g_j(x^*)=0$. Если $g_j(x^*)<0$, то ограничение называется *пассивным.*

Определение 3.6. Градиенты ограничений $g_1(x),\ldots,g_m(x)$ являются *линейно независимыми* в точке x^*, если равенство $\lambda_1\nabla g_1(x^*)+\lambda_2\nabla g_2(x^*)+\ldots+\lambda_m\nabla g_m(x^*)=0$ выполняется только при $\lambda_1=\lambda_2=\ldots=\lambda_m=0$. Если существуют числа $\lambda_1,\ldots,\lambda_m$, одновременно не равные нулю, для которых равенство выполняется, то градиенты *линейно зависимы*. В этом случае один из них есть линейная комбинация остальных. Один вектор $\nabla g_1(x^*)$ тоже образует систему векторов: при $\nabla g_1(x^*)\ne 0$ линейно независимую, а при $\nabla g_1(x^*)=0$ линейно зависимую.

Система векторов, содержащая нулевой вектор, всегда линейно зависима. Если $\operatorname{rang}A=\operatorname{rang}\left(\nabla g_1(x^*)\nabla g_2(x^*)\ldots\nabla g_m(x^*)\right)=m$, то система векторов линейно независима. Если $\operatorname{rang}A<m$, то система линейно зависима.

А. УСЛОВНЫЙ ЭКСТРЕМУМ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ ТИПА РАВЕНСТВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x)=f\left(x_1,\ldots,x_n\right)$ и функции ограничений $g_j(x)=g_j\left(x_1,\ldots,x_n\right)=0,\, j=1,\ldots,m,$ определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*)=\min_{x\in X}f(x)\,, \quad f(x^*)=\max_{x\in X}f(x)\,, \tag{3.7}$$

где $X=\left\{x \,\middle|\, g_j(x)=0, j=1,\ldots,m;\; m<n\right\}$.

Утверждение 3.1 (необходимые условия экстремума первого порядка).

Пусть x^* *есть точка локального экстремума в задаче* (3.7). *Тогда найдутся числа* $\lambda_0^*, \lambda_1^*, \ldots, \lambda_m^*$ *, не равные одновременно нулю и такие, что выполняются следующие условия*:

- *условие стационарности обобщенной функции Лагранжа по x*:

$$\frac{\partial L(x^*, \lambda_0^*, \lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, \ldots, n; \tag{3.8 а}$$

- *условие допустимости решения*:

$$g_j(x^*) = 0, \quad j = 1, \ldots, m. \tag{3.8 б}$$

Если при этом градиенты $\nabla g_1(x^*), \ldots, \nabla g_m(x^*)$ *в точке* x^* *линейно независимы* (*выполняется условие регулярности*), *то* $\lambda_0^* \neq 0$.

З а м е ч а н и я.

1. Точки x^*, удовлетворяющие системе при некоторых λ_0^*, λ^*, называются *условно-стационарными.*

2. При решении задач проверка условия регулярности затруднена, так как точка x^* заранее неизвестна. Поэтому, как правило, рассматриваются два случая: $\lambda_0^* = 0$ и $\lambda_0^* \neq 0$. Если $\lambda_0^* \neq 0$, в системе (3.8 а) полагают $\lambda_0^* = 1$. Это эквивалентно делению системы уравнений (3.8 а) на λ_0^* и замене $\dfrac{\lambda_j^*}{\lambda_0^*}$ на λ_j^*. При этом обобщенная функция Лагранжа становится классической, а сама система (3.8) имеет вид

$$\frac{\partial L(x^*, \lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, \ldots, n; \tag{3.9 а}$$

$$g_j(x^*) = 0, \quad j = 1, \ldots, m. \tag{3.9 б}$$

Здесь число уравнений равно числу неизвестных.

Точка экстремума, удовлетворяющая системе (3.8) при $\lambda_0^* \neq 0$, называется *регулярной*, а при $\lambda_0^* = 0$ – *нерегулярной.* Случай $\lambda_0^* = 0$ отражает вырожденность ограничений. При этом в обобщенной функции Лагранжа исчезает член, содержащий целевую функцию, а в необходимых условиях экстремума не используется информация, представляемая градиентом целевой функции.

Утверждение 3.2 (необходимые условия экстремума второго порядка).

Пусть x^* *– регулярная точка минимума* (*максимума*) *в задаче* (3.7) *и имеется решение* (x^*, λ^*) *системы* (3.9). *Тогда второй дифференциал классической функции Лагранжа, вычисленный в точке* (x^*, λ^*), *неотрицателен* (*неположителен*):

$$d^2 L(x^*, \lambda^*) \geq 0 \quad \left(d^2 L(x^*, \lambda^*) \leq 0 \right) \tag{3.10}$$

для всех $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i}\, dx_i = 0, \quad j = 1,\dots,m. \tag{3.11}$$

Утверждение 3.3 (достаточные условия экстремума).

Пусть имеется точка (x^*,λ^*), *удовлетворяющая системе* (3.9). *Если в этой точке*

$$d^2L(x^*,\lambda^*) > 0 \ \left(d^2L(x^*,\lambda^*) < 0\right) \tag{3.12}$$

для всех ненулевых $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i}\, dx_i = 0, \quad j = 1,\dots,m,$$

то точка x^* *является точкой локального минимума* (*максимума*) *в задаче* (3.7).

З а м е ч а н и я.

1. Достаточные и необходимые условия экстремума второго порядка проверяются в условно-стационарных точках, которые удовлетворяют системе (3.8) при $\lambda_0^* \neq 0$ или системе (3.9), так как для практики, безусловно, представляет интерес случай, когда в функции Лагранжа присутствует целевая функция, экстремум которой ищется.

2. Иногда удается проверить условие линейной независимости градиентов ограничений на множестве X (см. определение 3.6.). Если оно выполняется, то на шаге 1 следует записать классическую функцию Лагранжа (3.3), на шаге 2 можно записывать сразу систему (3.9), а на шаге 3 отсутствует случай $\lambda_0^* = 0$.

3. Для нахождения графического решения задачи (при $n = 2, m = 1$) следует:

а) построить множество допустимых решений X;

б) построить семейство линий уровня целевой функции и найти точки их касания с кривыми, описывающими ограничения. Эти точки являются «подозрительными» на условный экстремум;

в) исследовать поведение целевой функции при движении вдоль ограничения к исследуемой точке и от нее. Классифицировать точки, используя определение экстремума (см. определения 1.1 и 1.2).

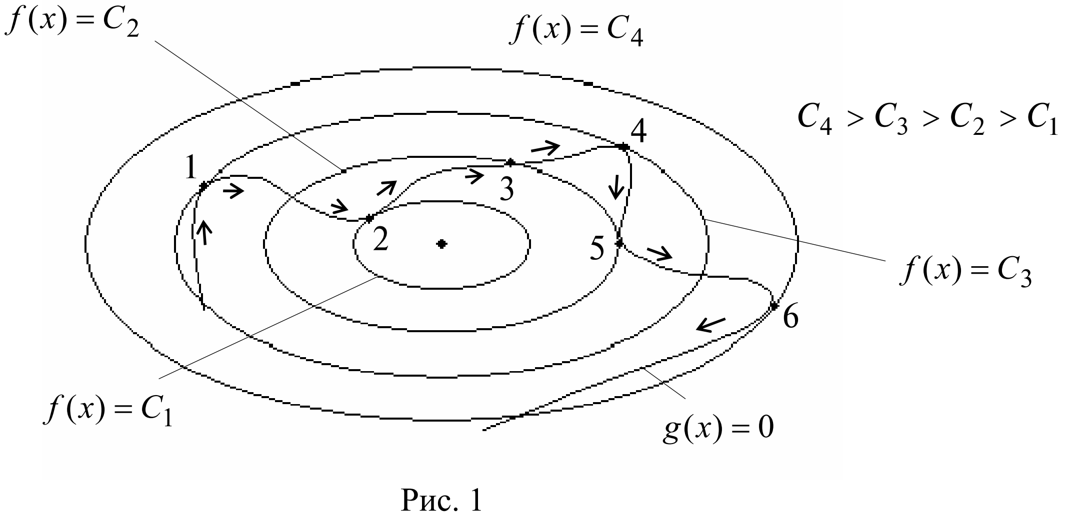


Рис. 1

На рис. 1 в точках 1 – 2, 4 – 6 линии уровня касаются ограничения. Исследование поведения функции в этих точках при движении по стрелкам показывает, что в точках 1, 4, 6 – локальный максимум, так как при приближении к ним функция возрастает, а затем убывает; в точках 2, 5 – локальный минимум, так как при приближении к ним функция убывает, а затем возрастает; в точке 3 нет условного экстремума, поскольку при приближении к ней и удалении дальше от нее функция возрастает.

4. При решении примеров для упрощения записи на шагах 2 и 3 алгоритма будем опускать знак «$*$», оставляя его только для значений x и λ, соответствующих условно-стационарным точкам.

Пример 1. Найти экстремум функции $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ на множестве $X = \left\{ x \mid x_1 + x_2 - 2 = 0 \right\}$: $f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \text{extr}$, $g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 = 0$.

□ Проверим условие регулярности. Так как $\nabla g_1(1,1)^T \neq 0$, то условие выполняется (см. определение 3.6). Поэтому будем пользоваться классической функцией Лагранжа (3.3).

1. Составим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda_1) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda_1 (x_1 + x_2 - 2).$$

2. Выпишем необходимые условия экстремума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x, \lambda_1)}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda_1 = 0 \Rightarrow x_1 = -\dfrac{\lambda_1}{2}$, $\dfrac{\partial L(x, \lambda_1)}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda_1 = 0 \Rightarrow x_2 = -\dfrac{\lambda_1}{2}$;

б) $g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 = 0$.

3. Решение системы: $x_1^* = x_2^* = 1, \lambda_1^* = -2$ – условно-стационарная точка.

4. Проверим выполнение достаточных условий экстремума:

а) $d^2 L(x^*, \lambda_1^*) = 2dx_1^2 + 2dx_2^2$, так как $\dfrac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_1^2} = \dfrac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_2^2} = 2$,

$$\frac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_2 \partial x_1} = 0;$$

б) $dg_1(x^*) = dx_1 + dx_2 = 0$, так как $\dfrac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} = \dfrac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} = 1$;

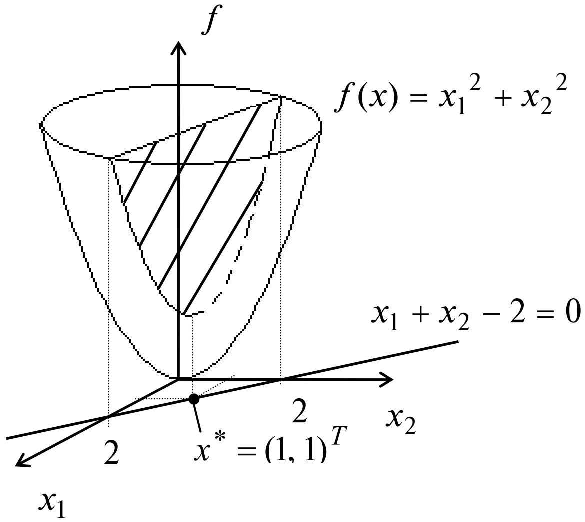
в) выразим дифференциал dx_1 через dx_2: $dx_1 = -dx_2$ и подставим в $d^2 L$;

г) так как $d^2 L(x^*, \lambda_1^*) = 4dx_2^2 > 0$ при $dx_2 \neq 0$, то в точке $x^* = (1,1)^T$ - регулярный локальный условный минимум.

5. Подсчитаем значение функции в точке условного экстремума: $f(x^*) = 2$.

Графическое решение задачи приведено на рис. 2.

Линии уровня функции $f(x)$ представляются окружностями, а множество допустимых решений X – графиком прямой. В точке $x^* = (1, 1)^T$, $f(x^*) = 2$ достигается глобальный минимум (рис. 2). Глобальный максимум на данном множестве не существует. Заметим, что в точке x^* линии уровня целевой функции касаются кривой, описывающей ограничения. ■



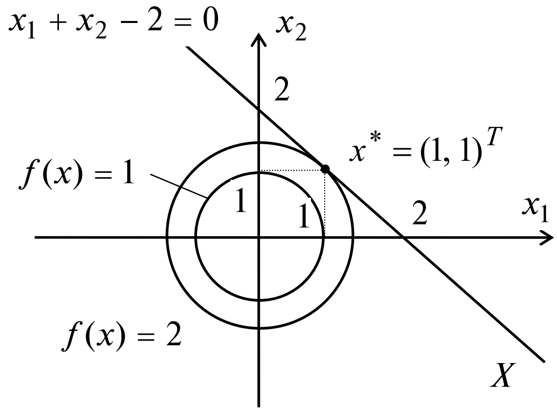


Рис. 2

Б. УСЛОВНЫЙ ЭКСТРЕМУМ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ ТИПА НЕРАВЕНСТВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f\left(x_1, \ldots, x_n\right)$ и функции ограничений $g_j(x) = g_j\left(x_1, \ldots, x_n\right) \le 0$, $j = 1, \ldots, m$, определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x); \qquad f(x^*) = \max_{x \in X} f(x), \tag{3.13}$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; g_j(x) \le 0,\ j = 1, \ldots, m \right\}$.

Утверждение 3.4 (необходимые условия минимума (максимума) первого порядка). *Пусть* x^* *– точка локального минимума (максимума) в задаче* (3.13). *Тогда найдется такое число* $\lambda_0^* \ge 0$ *и вектор* $\lambda^* = (\lambda_1^*, \ldots, \lambda_m^*)^T$, *не равные одновременно нулю и такие, что выполняются условия*:

- *стационарности обобщенной функции Лагранжа по* x:

$$\frac{\partial L(x^*, \lambda_0^*, \lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, \ldots, n\ ; \tag{3.14 а}$$

- *допустимости решения*:

$$g_j(x^*) \le 0\,, \quad j = 1, \ldots, m; \tag{3.14 б}$$

- *неотрицательности для условного минимума*:

$$\lambda_j^* \ge 0, \quad j = 1, \dots, m \qquad (3.14\ в)$$

(*неположительности для условного максимума*: $\lambda_j^* \le 0$, $j = 1, \dots, m$);

- *дополняющей нежесткости*:

$$\lambda_j^* \; g_j(x^*) = 0, \quad j = 1, \dots, m. \qquad (3.14\ г)$$

Если при этом градиенты активных в точке x^* *ограничений линейно независимы (выполняется условие регулярности), то* $\lambda_0^* \ne 0$.

З а м е ч а н и я.

1. Точки x^*, удовлетворяющие системе (3.14), называются *условно-стационарными*.

2. В отличие от случая ограничений типа равенств необходимые условия экстремума первого порядка формулируются отдельно для максимума и минимума.

3. Если в решаемой задаче ограничения записаны в форме $g_j(x) \ge 0$, то их необходимо переписать в виде, используемом в (3.13): $-g_j(x) \le 0$.

4. Далее будем использовать *множество индексов ограничений, активных в точке* x^*, которое обозначим через J_a.

5. Точка экстремума, удовлетворяющая системе (3.18) при $\lambda_0^* \ne 0$, называется *регулярной*, а при $\lambda_0^* = 0$ – *нерегулярной*. Случай $\lambda_0^* = 0$ отражает вырожденность ограничений.

6. Из условия дополняющей нежесткости следует, что если ограничение в точке x^* пассивное, т.е. $g_j(x^*) < 0$, то $\lambda_j^* = 0$, а если – активное, т.е. $g_j(x^*) = 0$, то $\lambda_j^* \ge 0$ (для минимума) и $\lambda_j^* \le 0$ (для максимума).

Утверждение 3.5 (достаточные условия минимума (максимума) первого порядка).

Пусть имеется точка (x^*, λ^*), *удовлетворяющая системе* (3.14) *при* $\lambda_0^* \ne 0$, *число активных ограничений в точке* x^* *совпадает с числом* n *переменных (при этом условие регулярности выполняется). Если* $\lambda_j^* > 0$ *для всех* $j \in J_a$, *то точка* x^* *– точка условного локального минимума. Если* $\lambda_j^* < 0$ *для всех* $j \in J_a$, *то* x^* *– точка условного локального максимума в задаче* (3.13).

Утверждение 3.6 (необходимое условие минимума (максимума) второго порядка).

Пусть x^* *– регулярная точка минимума* (*максимума*) *в задаче* (3.13) *и имеется решение* (x^*, λ^*) *системы* (3.14). *Тогда второй дифференциал классической функции Лагранжа, вычисленный в точке* (x^*, λ^*), *неотрицателен* (*неположителен*):

$$d^2 L(x^*, \lambda^*) \ge 0 \qquad (d^2 L(x^*, \lambda^*) \le 0) \qquad (3.15)$$

для всех $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = 0, \quad j \in J_a, \quad \lambda_j^* > 0 \quad (\lambda_j^* < 0);$$

$$dg_j(x^*) \le 0, \quad j \in J_a, \quad \lambda_j^* = 0.$$

Утверждение 3.7 (достаточные условия экстремума второго порядка).

Пусть имеется точка (x^*, λ^*), *удовлетворяющая системе* (3.14) *при* $\lambda_0^* \ne 0$. *Если в этой точке* $d^2 L(x^*, \lambda^*) > 0$ $(d^2 L(x^*, \lambda^*) < 0)$ *для всех ненулевых* $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = 0, \quad j \in J_a, \quad \lambda_j^* > 0 \quad (\lambda_j^* < 0);$$

$$dg_j(x^*) \le 0, \quad j \in J_a, \quad \lambda_j^* = 0,$$

то точка x^* *является точкой локального минимума (максимума) в задаче* (3.13).

Пример 2. Найти условный экстремум в задаче

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \text{extr},$$

$$g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 \le 0.$$

☐ 1. Составим обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda_0, \lambda_1) = \lambda_0 (x_1^2 + x_2^2) + \lambda_1 (x_1 + x_2 - 2).$$

2. Выпишем необходимые условия первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x, \lambda_0, \lambda_1)}{\partial x_1} = 2\lambda_0 x_1 + \lambda_1 = 0$, $\dfrac{\partial L(x, \lambda_0, \lambda_1)}{\partial x_2} = 2\lambda_0 x_2 + \lambda_1 = 0$;

б) $x_1 + x_2 - 2 \le 0$;

в) $\lambda_1 \ge 0$ (для минимума), $\lambda_1 \le 0$ (для максимума);

г) $\lambda_1 (x_1 + x_2 - 2) = 0$.

3. Решим систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0 = 0$, тогда из условия «а» следует, что $\lambda_1 = 0$, а это противоречит требованию утверждения 3.4 о существовании ненулевого вектора $(\lambda_0, \lambda)^T$.

Второй случай: $\lambda_0 \ne 0$. Поделив уравнения приведенной в п. 2 системы на λ_0 и заменив $\dfrac{\lambda_1}{\lambda_0}$ на λ_1, получим:

а) $\dfrac{\partial L(x,\lambda_1)}{\partial x_1} = 2x_1 + \lambda_1 = 0$, $\quad \dfrac{\partial L(x,\lambda_1)}{\partial x_2} = 2x_2 + \lambda_1 = 0$;

б) $x_1 + x_2 - 2 \le 0$;

в) $\lambda_1 \ge 0$ (для минимума), $\lambda_1 \le 0$ (для максимума);

г) $\lambda_1 (x_1 + x_2 - 2) = 0$.

Из условия «г» дополняющей нежесткости следует:

1) $\lambda_1 = 0$ (фактически решается задача поиска безусловного экстремума). Тогда $x_1^* = x_2^* = 0$, $\lambda_1^* = 0$ и условие «б» выполняются. Выполняются необходимые условия и для минимума, и для максимума.

2) $\lambda_1 \ne 0$, тогда из системы

$$x_1 + x_2 - 2 = 0, \quad 2x_1 + \lambda_1 = 0, \quad 2x_2 + \lambda_1 = 0$$

получим $x_1^* = x_2^* = 1$; $\lambda_1^* = -2$. Так как $\lambda_1^* < 0$, то необходимое условие минимума не выполняется (в точке $(1,1)^T$ нет минимума), но выполняется необходимое условие максимума. Таким образом, имеем две условно-стационарные точки.

4. Проверим выполнение достаточных условий экстремума.

В точке $x^* = (0,0)^T$ ограничение не является активным, так как $g_1(x^*) = -2 < 0$, поэтому достаточные условия первого порядка не удовлетворяются. Проверим условия второго порядка. Так как $d^2 L(x^*,\lambda^*) = 2dx_1^2 + 2dx_2^2 > 0$ при $dx \ne 0$, то в точке $x^* = (0,0)^T$ – регулярный локальный условный минимум (рис.3).

В точке $x^* = (1,1)^T$ ограничение является активным, но $l = 1 < n = 2$, поэтому достаточное условие первого порядка не выполняется. Проверим условие второго порядка. Имеем

$$d^2 L(x^*,\lambda^*) = 2dx_1^2 + 2dx_2^2,$$

$$dg_1(x^*) = dx_1 + dx_2 = 0 \Rightarrow dx_1 = -dx_2.$$

Следовательно, $d^2 L(x^*,\lambda^*) = 4dx_2^2 > 0$ при $dx_2 \ne 0$. Так как в этой точке $\lambda_1^* = -2 < 0$, то достаточное условие максимума не выполняется. Проверим необходимое условие максимума второго порядка. Так как $d^2 L(x^*,\lambda^*) = 4dx_2^2 \ge 0$ при любых dx_2, то необходимое условие максимума не выполняется, поэтому в точке $x^* = (1,1)^T$ максимума нет.

5. Вычислим значение функции в точке условного минимума: $f(x^*) = 0$. ■

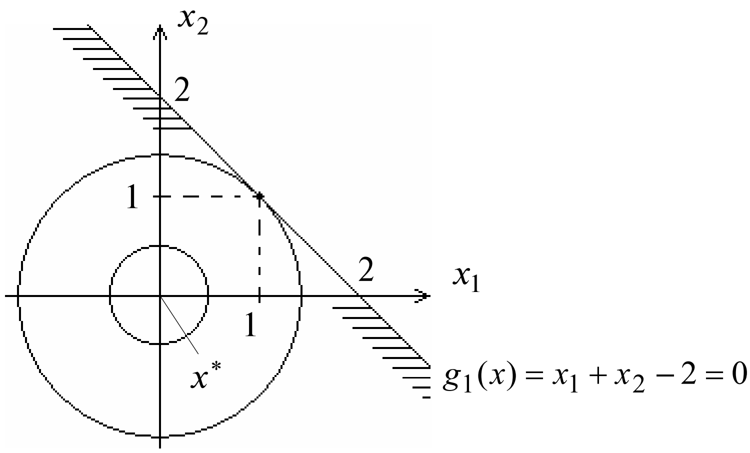


Рис. 3

В. УСЛОВНЫЙ ЭКСТРЕМУМ ПРИ СМЕШАННЫХ ОГРАНИЧЕНИЯХ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f(x_1, \ldots, x_n)$ и функции ограничений типа равенств и неравенств: $g_j(x) = 0$, $j = 1, \ldots, m$; $g_j(x) \le 0$, $j = m+1, \ldots, p$, определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x); \quad f(x^*) = \max_{x \in X} f(x), \tag{3.16}$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; \begin{matrix} g_j(x) = 0, \ j = 1, \ldots, m; \ m < n \\ g_j(x) \le 0, \ j = m+1, \ldots, p \end{matrix} \right\}$.

Утверждение 3.8 (необходимые условия минимума (максимума) первого порядка). *Пусть* x^* *– точка локального минимума* (*максимума*) *в задаче* (3.16). *Тогда найдется такое число* $\lambda_0^* \ge 0$ *и вектор* $\lambda^* = (\lambda_1^*, \ldots, \lambda_p^*)^T$, *не равные одновременно нулю и такие, что выполняются условия*:

- *стационарности обобщенной функции Лагранжа по* x:

$$\frac{\partial L(x^*, \lambda_0^*, \lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, \ldots, n; \tag{3.17 а}$$

- *допустимости решения*:

$$g_j(x^*) = 0, \ j = 1, \ldots, m; \quad g_j(x^*) \le 0, \ j = m+1, \ldots, p; \tag{3.17 б}$$

- *неотрицательности для условного минимума*:

$$\lambda_j^* \ge 0, \quad j = m+1,\dots,p \tag{3.17 в}$$

(*неположительности для условного максимума*: $\lambda_j^* \le 0$, $j = m+1,\dots,p$);

- *дополняющей нежесткости*:

$$\lambda_j^* \; g_j(x^*) = 0, \quad j = m+1,\dots,p. \tag{3.17 г}$$

Если при этом градиенты активных ограничений-неравенств и ограничений-равенств в точке x^* линейно независимы (выполняется *условие регулярности*), то $\lambda_0^* \ne 0$.

Следует подчеркнуть, что условия дополняющей нежесткости и знакоопределенности множителей Лагранжа записываются только для ограничений-неравенств.

Утверждение 3.9 (достаточные условия минимума (максимума) первого порядка).

Пусть имеется точка (x^*,λ^*), *удовлетворяющая системе* (3.17) *при* $\lambda_0^* \ne 0$, *суммарное число активных ограничений-неравенств в точке* x^* *и ограничений-равенств совпадает с числом* n *переменных (при этом условие регулярности выполняется). Если* $\lambda_j^* > 0$ *для всех* $j \in J_a$, *то точка* x^* *– точка условного локального минимума в задаче* (3.16). *Если* $\lambda_j^* < 0$ *для всех* $j \in J_a$, *то* x^* *– точка условного локального максимума.*

Утверждение 3.10 (необходимые условия минимума (максимума) второго порядка).

Пусть x^* *– регулярная точка минимума* (*максимума*) *в задаче* (3.16) *и имеется решение* (x^*,λ^*) *системы* (3.17). *Тогда второй дифференциал классической функции Лагранжа, вычисленный в точке* (x^*,λ^*), *неотрицателен* (*неположителен*):

$$d^2L(x^*,\lambda^*) \ge 0 \qquad (d^2L(x^*,\lambda^*) \le 0)$$

для всех $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = 0,\; j = 1,\dots,m \;\; и \;\; j \in J_a,\; \lambda_j^* > 0 \;\; (\lambda_j^* < 0);$$

$$dg_j(x^*) \le 0,\;\; j \in J_a,\;\; \lambda_j^* = 0.$$

Утверждение 3.11 (достаточные условия экстремума второго порядка).

Пусть имеется точка (x^*,λ^*), *удовлетворяющая системе* (3.17) *при* $\lambda_0^* \ne 0$. *Если в этой точке* $d^2L(x^*,\lambda^*) > 0$ $(d^2L(x^*,\lambda^*) < 0)$ *для всех ненулевых* $dx \in R^n$ *таких, что*

$$dg_j(x^*) = 0,\; j = 1,\dots,m \;\; и \;\; j \in J_a,\; \lambda_j^* > 0 \;\; (\lambda_j^* < 0);$$
$$dg_j(x^*) \le 0,\;\; j \in J_a,\;\; \lambda_j^* = 0,$$

то точка x^* *является точкой локального минимума (максимума) в задаче* (3.16).

Пример 3. Найти условный экстремум в задаче

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \mathrm{extr},$$

$$g_1(x) = x_1 - 1 = 0,$$

$$g_2(x) = x_1 + x_2 - 2 \le 0.$$

☐ 1. Составим обобщенную функцию Лагранжа:

$$L\left(x, \lambda_0, \lambda\right) = \lambda_0\,(x_1^2 + x_2^2) + \lambda_1\,(x_1 - 1) + \lambda_2 (x_1 + x_2 - 2).$$

2. Выпишем необходимые условия экстремума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial\, L(x, \lambda_0, \lambda)}{\partial\, x_1} = 2\lambda_0 x_1 + \lambda_1 + \lambda_2 = 0$, $\dfrac{\partial\, L(x, \lambda_0, \lambda)}{\partial\, x_2} = 2\lambda_0 x_2 + \lambda_2 = 0$;

б) $x_1 - 1 = 0,\ x_1 + x_2 - 2 \le 0$;

в) $\lambda_2 \ge 0$ (для минимума), $\lambda_2 \le 0$ (для максимума);

г) $\lambda_2\ (x_1 + x_2 - 2) = 0$.

3. Решим систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0 = 0$, тогда $\lambda_1 = 0$ и $\lambda_2 = 0$, что противоречит утверждению 3.8.

Второй случай: $\lambda_0 \ne 0$. Поделив уравнения приведенной в п. 2 системы на λ_0 и заменив $\dfrac{\lambda_1}{\lambda_0}$ на λ_1 и $\dfrac{\lambda_2}{\lambda_0}$ на λ_2, условие «а» запишем в виде

$$\frac{\partial\, L(x, \lambda)}{\partial\, x_1} = 2x_1 + \lambda_1 + \lambda_2 = 0,$$

$$\frac{\partial\, L(x, \lambda)}{\partial\, x_2} = 2x_2 + \lambda_2 = 0.$$

Остальные соотношения сохранят свой вид.

Рассмотрим $2^{p-m} = 2$ варианта удовлетворения условия «г» дополняющей нежесткости:

1) $\lambda_2 = 0$, тогда $x_2 = 0$. Из ограничения следует, что $x_1 = 1$, а из условия «а» $\lambda_1 = -2$. Имеем условно-стационарную точку A : $x_1^* = 1,\ x_2^* = 0,\ \lambda_1^* = -2,\ \lambda_2^* = 0$, в которой удовлетворяются необходимые условия и минимума, и максимума;

2) $\lambda_2 \ne 0$, тогда $x_1 + x_2 - 2 = 0,\ 2x_1 + \lambda_1 + \lambda_2 = 0,\ 2x_2 + \lambda_2 = 0,\ x_1 - 1 = 0$. Получаем условно-стационарную точку B: $x_1^* = 1,\ x_2^* = 1,\ \lambda_1^* = 0,\ \lambda_2^* = -2 < 0$, в которой удовлетворяются необходимые условия максимума.

4. Проверим выполнение достаточных условий экстремума.

Исследуем точку A. Ограничение-неравенство не является активным. Поэтому $l = 1 < n = 2$ и достаточные условия первого порядка не выполняются. Проверим условия второго порядка: $d^2 L(A) = 2dx_1^2 + 2dx_2^2$. Так как ограничение $g_2(x) \le 0$ в точке A пассивно, то $dg_1(A) = dx_1 = 0$ и $d^2 L(A) = 2dx_2^2 > 0$ при $dx_2 \ne 0$. Следовательно, в точке A – условный локальный минимум.

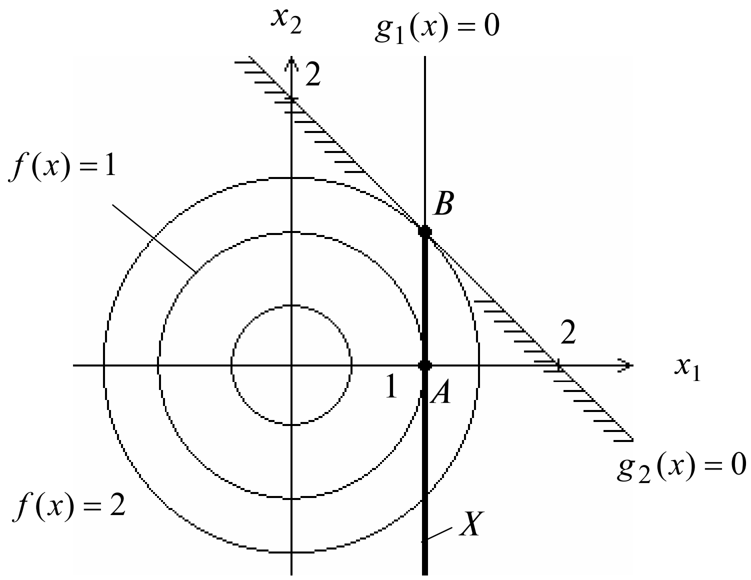


Рис. 4

Исследуем точку B. Ограничение $g_2(x) \le 0$ является активным, поэтому $l = 2 = n = 2$. Так как $\lambda_2^* = -2 < 0$, то в точке B выполняются достаточные условия максимума первого порядка и она является точкой локального максимума. Из методических соображений проверим достаточные условия второго порядка: $d^2 L(B) = 2dx_1^2 + 2dx_2^2$. В точке B ограничение $g_2(x) = 0$ активно: $dg_1(B) = dx_1 = 0$, $dg_2(B) = dx_1 + dx_2 = 0$. Отсюда $dx_1 = dx_2 = 0$ и $d^2 L(B) = 0$. Поэтому требуется дополнительное исследование. На рис. 4 видно, что в точке B – условный локальный максимум, поскольку при приближении к этой точке вдоль множества X функция возрастает, а при движении от нее – убывает. Это подтверждает сделанный ранее вывод.

5. Значения функции в точках экстремума: $f(A) = 1$, $f(B) = 2$. ■

Лекция **3**

4. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Принципы построения численных методов. Применение необходимых и достаточных условий безусловного экстремума эффективно для решения ограниченного числа примеров, в которых вытекающие из условий соотношения имеют аналитическое решение. Для решения большинства практических задач они не могут быть рекомендованы по следующим причинам:

- целевая функция $f(x)$ может не иметь непрерывных производных до второго порядка включительно;
- использование необходимого условия первого порядка связано с решением системы *n* в общем случае нелинейных алгебраических уравнений, что представляет собой самостоятельную задачу, трудоемкость решения которой сравнима с трудоемкостью численного решения поставленной задачи поиска экстремума;
- возможны случаи, когда о целевой функции известно лишь то, что ее значение может быть вычислено с нужной точностью, а сама функция задана неявно.

Подавляющее большинство численных методов оптимизации относится к классу *итерационных*, т.е. порождающих последовательность точек в соответствии с предписанным набором правил, включающим критерий окончания. При заданной начальной точке x^0 методы генерируют последовательность $x^0, x^1, x^2, \ldots$ Преобразование точки x^k в x^{k+1} представляет собой *итерацию*.

Для определенности рассмотрим задачу поиска безусловного локального минимума:

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

Численное решение задачи безусловной оптимизации, как правило, связано с построением последовательности $\left\{x^k\right\}$ точек, обладающих свойством $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, $k = 0,1,\ldots$.

Общее правило построения последовательности $\left\{x^k\right\}$ имеет вид

$$x^{k+1} = x^k + t_k\, d^k, \quad k = 0,1,\ldots ,$$

где точка x^0 – *начальная точка* поиска; d^k – приемлемое направление перехода из точки x^k в точку x^{k+1}, обеспечивающее выполнение условия убывания функции и называемое *направлением спуска*; t_k – *величина шага*.

Начальная точка поиска x^0 задается, исходя из физического содержания решаемой задачи и наличия априорной информации о положении точек экстремума.

Классификация численных методов поиска безусловного экстремума. В зависимости от наивысшего порядка частных производных функции $f(x)$, используемых для формирования d^k и t_k, численные методы решения задачи безусловной минимизации принято делить на три группы:

- *методы нулевого порядка*, использующие только информацию о значении функции $f(x)$;
- *методы первого порядка*, использующие информацию о первых производных функции $f(x)$;
- *методы второго порядка*, требующие для своей реализации знания вторых производных функции $f(x)$.

МЕТОДЫ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА

А. МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

Постановка задачи. Требуется найти безусловный минимум функции $f(x)$ одной переменной, т.е. такую точку $x^* \in R$, что

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

Поставленная *задача одномерной минимизации* может быть решена с помощью необходимых и достаточных условий безусловного экстремума. Однако проблема получения решения уравнения $\frac{df(x)}{dx} = 0$ может оказаться весьма сложной. Более того, в практических задачах функция $f(x)$ может быть не задана в аналитическом виде или часто неизвестно, является ли она дифференцируемой. Поэтому получение численного решения поставленной задачи является важным для приложений.

Замечания.

1. Для методов одномерной минимизации типично задание априорной информации о положении точки минимума с помощью начального *интервала неопределенности* $L_0 = [a_0, b_0]$. Предполагается, что точка минимума x^* принадлежит интервалу L_0, но ее точное значение неизвестно.

2. Большинство известных методов одномерной минимизации применяется для класса унимодальных функций.

Определение. Функция $f(x)$ называется *унимодальной на интервале* $L_0 = [a_0, b_0]$, если она достигает глобального минимума на $[a_0, b_0]$ в единственной точке x^*, причем слева от x^* эта функция строго убывает, а справа от x^* – строго возрастает.

3. Методы одномерной минимизации широко применяются в методах первого и второго порядков для нахождения оптимальной величины шага. При этом левая граница начального интервала неопределенности, как правило, совпадает с началом координат, т.е. $a_0 = 0$.

Стратегия поиска включает в себя три этапа:

1. Выбор начального интервала неопределенности. Границы a_0, b_0 интервала должны быть такими, чтобы функция $f(x)$ была унимодальной.

2. Уменьшение интервала неопределенности.

3. Проверку условия окончания. Поиск заканчивается, когда длина текущего интервала неопределенности $[a_k, b_k]$ оказывается меньше установленной величины.

Ответом является множество точек, принадлежащих последнему интервалу неопределенности, среди которых каким-либо образом выбирается решение задачи x^*.

В некоторых методах заранее задается или находится количество N вычислений функции. В этом случае продолжительность поиска ограничена.

А1. Метод дихотомии

Стратегия поиска

Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 1). Для их нахождения текущий интервал неопределенности делится пополам и в обе стороны от середины откладывается по $\frac{\varepsilon}{2}$, где ε – малое положительное число. Условия окончания процесса поиска стандартные: поиск заканчивается, когда длина текущего интервала неопределенности оказывается меньше установленной величины.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальный интервал неопределенности $L_0 = [a_0, b_0]$, $\varepsilon > 0$ – малое число, $l > 0$ – точность.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $y_k = \frac{a_k + b_k - \varepsilon}{2}$, $f(y_k)$, $z_k = \frac{a_k + b_k + \varepsilon}{2}$, $f(z_k)$.

Шаг 4. Сравнить $f(y_k)$ с $f(z_k)$:

а) если $f(y_k) \le f(z_k)$, положить $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = z_k$ (рис. 1, *а*) и перейти к шагу 5;

б) если $f(y_k) > f(z_k)$, положить $a_{k+1} = y_k$, $b_{k+1} = b_k$ (рис. 1, *б*).

Шаг 5. Вычислить $|L_{2(k+1)}| = |b_{k+1} - a_{k+1}|$ и проверить условие окончания:

а) если $|L_{2(k+1)}| \le l$, процесс поиска завершить. Точка минимума принадлежит интервалу: $x^* \in L_{2(k+1)} = [a_{k+1}, b_{k+1}]$. В качестве приближенного решения можно взять середину последнего интервала: $x^* \cong \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$;

б) если $|L_{2(k+1)}| > l$, положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 3.

З а м е ч а н и е. Текущие интервалы неопределенности $L_0, L_2, L_4, \ldots$ имеют четные номера, указывающие на количество сделанных вычислений функции.

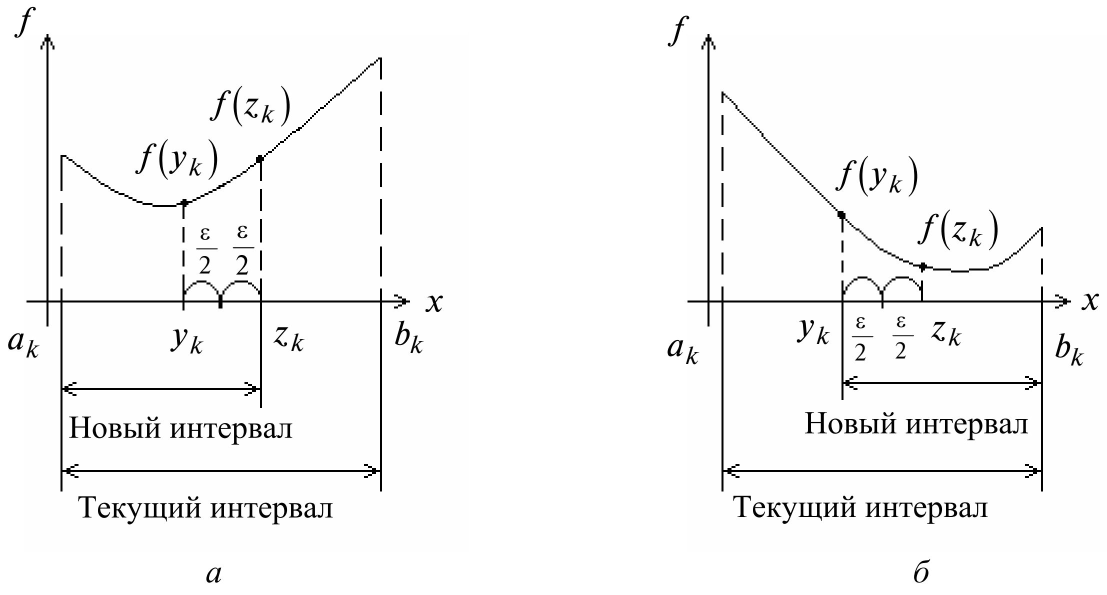


Рис. 1

А2. Метод золотого сечения

В методе золотого сечения в качестве точек вычисления функции выбираются точки золотого сечения.

Определение. Точка производит *золотое сечение отрезка*, если отношение длины всего отрезка к большей части равно отношению большей части к меньшей.

На отрезке $[a_0, b_0]$ имеются две симметричные относительно его концов точки y_0 и z_0:

$$\frac{b_0 - a_0}{b_0 - y_0} = \frac{b_0 - y_0}{y_0 - a_0} = \frac{b_0 - a_0}{z_0 - a_0} = \frac{z_0 - a_0}{b_0 - z_0} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \cong 1{,}618\,.$$

При этом точка y_0 производит золотое сечение отрезка $[a_0, z_0]$, а точка z_0 – отрезка $[y_0, b_0]$ (рис. 2).

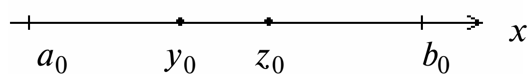


Рис. 2

Стратегия поиска

Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм уменьшения интервала опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 2). В качестве точек вычисления функции выбираются точки золотого сечения. Тогда с учетом свойств золотого сечения на каждой итерации, кроме первой, требуется произвести только одно новое вычисление функции. Условия окончания процесса поиска стандартные: поиск заканчивается, когда длина текущего интервала неопределенности оказывается меньше установленной величины.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальный интервал неопределенности $L_0 = [a_0, b_0]$, точность $l > 0$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить

$$y_0 = a_0 + \frac{3-\sqrt{5}}{2}(b_0 - a_0); \quad z_0 = a_0 + b_0 - y_0, \quad \frac{3-\sqrt{5}}{2} = 0{,}38196.$$

Шаг 4. Вычислить $f(y_k)$, $f(z_k)$.

Шаг 5. Сравнить $f(y_k)$ и $f(z_k)$:

а) если $f(y_k) \le f(z_k)$, то положить $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = z_k$

и $y_{k+1} = a_{k+1} + b_{k+1} - y_k$, $z_{k+1} = y_k$ (рис. 3, *а*) и перейти к шагу 6;

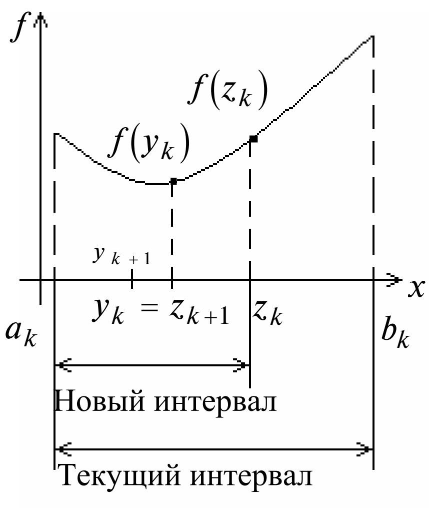
б) если $f(y_k) > f(z_k)$, то положить $a_{k+1} = y_k$, $b_{k+1} = b_k$

и $y_{k+1} = z_k$, $z_{k+1} = a_{k+1} + b_{k+1} - z_k$ (рис. 3, *б*).

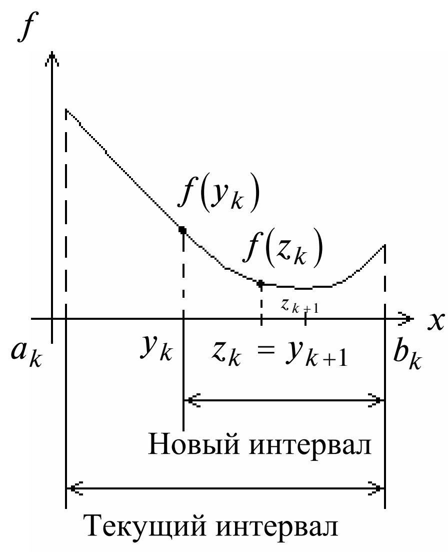
Шаг 6. Вычислить $\Delta = |a_{k+1} - b_{k+1}|$ и проверить условие окончания:

а) если $\Delta \le l$, процесс поиска завершить. Точка минимума принадлежит интервалу: $x^* \in [a_{k+1}, b_{k+1}]$. В качестве приближенного решения можно взять середину последнего интервала: $x^* \cong \frac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$;

б) если $\Delta > l$, положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 4.



а



б

Рис. 3

З а м е ч а н и я .

1. Текущие интервалы неопределенности имеют следующий вид: $L_0, L_2, L_3, L_4, \ldots$. Они отражают тот факт, что на первой итерации производится два вычисления функции, а на последующих – по одному.

2. Сокращение длины интервала неопределенности постоянно:

$$\frac{|L_0|}{|L_2|} = \frac{|L_2|}{|L_3|} = \frac{|L_3|}{|L_4|} = \ldots = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \cong 1{,}618 .$$

А3. Метод квадратичной интерполяции

Стратегия поиска

Задается начальная точка и с помощью пробного шага находятся три опорные точки таким образом, чтобы они располагались как можно ближе к искомой точке минимума. В полученных точках вычисляются значения функции. Затем строится интерполяционный полином второй степени, проходящий через имеющиеся три точки. В качестве приближения точки минимума берется точка минимума полинома. Процесс поиска заканчивается, когда полученная точка отличается от наилучшей из трех опорных точек не более чем на заданную величину.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x_1, величину шага $\Delta x > 0$, ε_1 и ε_2 – малые положительные числа, характеризующие точность.

Шаг 2. Вычислить $x_2 = x_1 + \Delta x$.

Шаг 3. Вычислить $f(x_1) = f_1$ и $f(x_2) = f_2$.

Шаг 4. Сравнить $f(x_1)$ с $f(x_2)$:

а) если $f(x_1) > f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 + 2\Delta x$ (рис. 4, *а*);

б) если $f(x_1) \le f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 - \Delta x$ (рис. 4, *б*).

Шаг 5. Вычислить $f(x_3) = f_3$.

Шаг 6. Найти $F_{\min} = \min\{f_1, f_2, f_3\}$, $x_{\min} = x_i : f(x_i) = F_{\min}$.

Шаг 7. Вычислить точку минимума интерполяционного полинома, построенного по трем точкам:

$$\bar{x} = \frac{1}{2} \frac{\left(x_2^2 - x_3^2\right) f_1 + \left(x_3^2 - x_1^2\right) f_2 + \left(x_1^2 - x_2^2\right) f_3}{\left(x_2 - x_3\right) f_1 + \left(x_3 - x_1\right) f_2 + \left(x_1 - x_2\right) f_3},$$

и величину функции $f(\bar{x})$(рис. 4).

Если знаменатель в формуле для $\bar{x}$ на некоторой итерации обращается в нуль, то результатом интерполяции является прямая. В этом случае рекомендуется обозначить $x_1 = x_{\min}$ и перейти к шагу 2.

Шаг 8. Проверить выполнение условий окончания:

$$\left|\frac{F_{\min} - f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| < \varepsilon_1, \quad \left|\frac{x_{\min} - \bar{x}}{\bar{x}}\right| < \varepsilon_2 .$$

Тогда:

а) если оба условия выполнены, процедуру закончить и положить $x^* \cong \bar{x}$;

б) если хотя бы одно из условий не выполнено и $\bar{x} \in [x_1, x_3]$, выбрать наилучшую точку ($x_{\min}$ или $\bar{x}$) и две точки по обе стороны от нее. Обозначить эти точки в естественном порядке и перейти к шагу 6;

в) если хотя бы одно из условий не выполнено и $\bar{x} \notin [x_1, x_3]$, то положить $x_1 = \bar{x}$ и перейти к шагу 2.

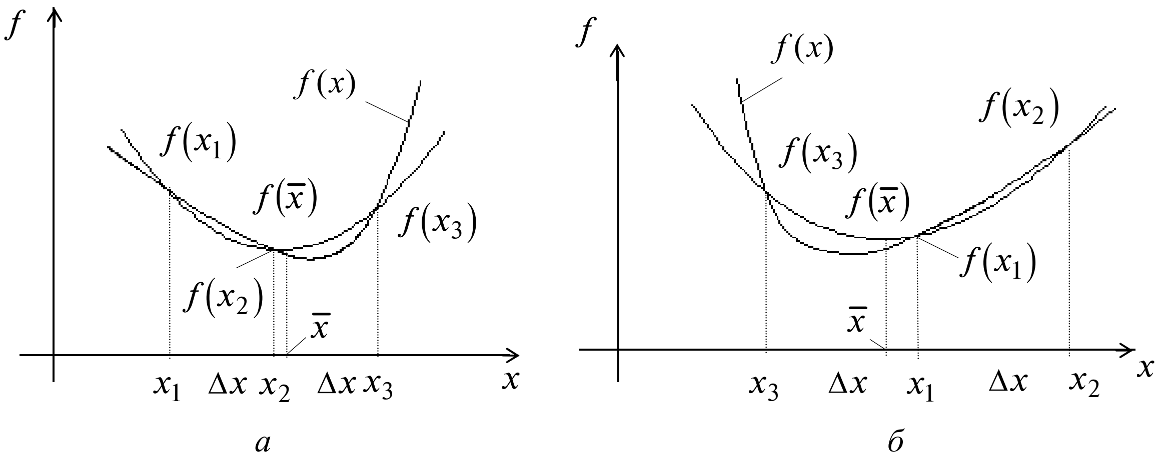


Рис. 4

З а м е ч а н и е. Для решения задачи одномерной минимизации также применяются: метод равномерного поиска, метод деления интервала пополам, метод Фибоначчи, кубической интерполяции.

Лекция 4 (продолжение лекции 3)

Б. МЕТОД КОНФИГУРАЦИЙ

Постановка задачи

Требуется найти безусловный минимум функции $f(x)$ многих переменных, т.е. найти такую точку $x^* \in R^n$, что $f(x^*) = \min\limits_{x \in R^n} f(x)$.

Стратегия поиска

Метод конфигураций, или метод Хука–Дживса (Hooke–Jeeves), представляет собой комбинацию *исследующего поиска* с циклическим изменением переменных и ускоряющего *поиска по образцу*. Исследующий поиск ориентирован на выявление локального поведения целевой функции и определение направления ее убывания вдоль «оврагов». Полученная информация используется при поиске по образцу при движении вдоль «оврагов».

Исследующий поиск начинается в некоторой начальной точке x^0, называемой *старым базисом*. В качестве множества направлений поиска выбирается множество координатных направлений. Задается величина шага, которая может быть различной для разных координатных направлений и переменной в процессе поиска. Фиксируется первое координатное направление и делается шаг в сторону увеличения соответствующей переменной. Если значение функции в пробной точке меньше значения функции в исходной точке, шаг считается удачным. В противном случае необходимо вернуться в предыдущую точку и сделать шаг в противоположном направлении с последующей проверкой поведения функции. После перебора всех координат исследующий поиск завершается. Полученная точка называется *новым базисом* (на рис. 5 в точке x^0 произведен исследующий поиск и получена точка x^1 – новый базис). Если исследующий поиск с данной величиной шага неудачен, то она уменьшается и процедура продолжается. Поиск заканчивается, когда текущая величина шага станет меньше некоторой величины.

Поиск по образцу заключается в движении по направлению от старого базиса к новому (от точки x^0 через точку x^1, из точки x^1 через точку x^2, из x^2 через x^3 на рис. 5). Величина ускоряющего шага задается ускоряющим множителем λ. Успех поиска по образцу определяется с помощью исследующего поиска из полученной точки (например из точек 6, 11, 15 на рис. 5). Если при этом значение в наилучшей точке меньше, чем в точке предыдущего базиса, то поиск по образцу удачен (точки 6, 11 – результат удачного поиска по образцу, а точка 15 – неудачного). Если поиск по образцу неудачен, происходит возврат в новый базис, где продолжается исследующий поиск с уменьшенным шагом. На рис. 5 удачный поиск отображается сплошными линиями, а неудачный – штриховыми, числа соответствуют порождаемым алгоритмом точкам.

Обозначим через $d_1, \ldots, d_n$ – координатные направления:

$$d_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad d_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots, \quad d_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

При поиске по направлению d_i меняется только переменная x_i, а остальные переменные остаются зафиксированными.

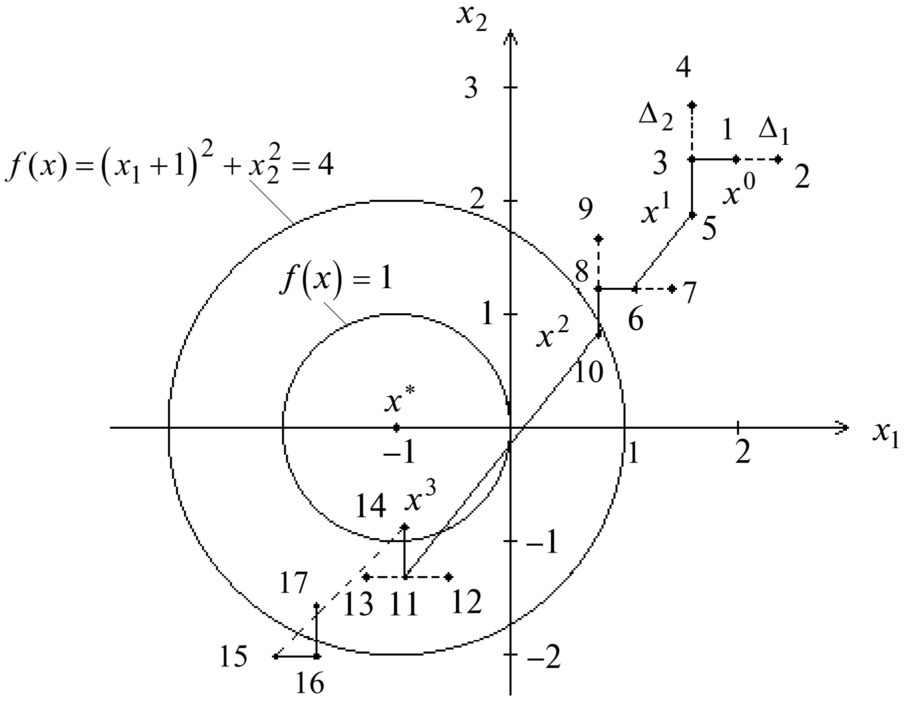


Рис. 5

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x^0, число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма, начальные величины шагов по координатным направлениям $\Delta_1, \ldots, \Delta_n \geq \varepsilon$, ускоряющий множитель $\lambda > 0$, коэффициент уменьшения шага $\alpha > 1$. Положить $y^1 = x^0,\ i = 1,\ k = 0$.

Шаг 2. Осуществить исследующий поиск по выбранному координатному направлению:

а) если $f(y^i + \Delta_i\, d_i) < f(y^i)$, т.е. $f(y_1^i,\ldots,y_i^i + \Delta_i,\ldots,y_n^i) < f(y_1^i,\ldots,y_i^i,\ldots,y_n^i)$, шаг считается удачным. В этом случае следует положить $y^{i+1} = y^i + \Delta_i\, d_i$ и перейти к шагу 3;

б) если в п. “а” шаг неудачен, то делается шаг в противоположном направлении. Если $f(y^i - \Delta_i\ d_i) < f(y^i)$, т.е. $f(y_1^i,\ldots,y_i^i - \Delta_i,\ldots,y_n^i) < f(y_1^i,\ldots,y_i^i,\ldots,y_n^i)$, шаг считается удачным. В этом случае следует положить $y^{i+1} = y^i - \Delta_i\, d_i$ и перейти к шагу 3;

в) если в пп. “а” и “б” шаги неудачны, положить $y^{i+1} = y^i$.

Шаг 3. Проверить условия:

а) если $i < n$, то положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 2 (продолжить исследующий поиск по оставшимся направлениям);

б) если $i = n$, проверить успешность исследующего поиска:

- если $f(y^{n+1}) < f(x^k)$, перейти к шагу 4;
- если $f(y^{n+1}) \ge f(x^k)$, перейти к шагу 5.

Шаг 4. Провести поиск по образцу. Положить

$$x^{k+1} = y^{n+1}, \quad y^1 = x^{k+1} + \lambda(x^{k+1} - x^k), \quad i = 1, \quad k = k+1$$

и перейти к шагу 2.

Шаг 5. Проверить условие окончания:

а) если все $\Delta_i \le \varepsilon$, то поиск закончить: $x^* \cong x^k$;

б) для тех i, для которых $\Delta_i > \varepsilon$, уменьшить величину шага: $\Delta_i = \dfrac{\Delta_i}{\alpha}$. Положить $y^1 = x^k$, $x^{k+1} = x^k$, $k = k+1$, $i = 1$ и перейти к шагу 2.

З а м е ч а н и е. В алгоритме можно использовать одинаковую величину шага по координатным направлениям, т.е. вместо $\Delta_1, \Delta_2, \ldots, \Delta_n$ применять Δ.

В. МЕТОД ДЕФОРМИРУЕМОГО МНОГОГРАННИКА

Постановка задачи

Требуется найти безусловный минимум функции $f(x)$ многих переменных, т.е. найти такую точку $x^* \in R^n$, что $f(x^*) = \min\limits_{x \in R^n} f(x)$.

Стратегия поиска

В основу метода деформируемого многогранника, или метода Нелдера–Мида (Nelder–Mead), положено построение последовательности систем $n+1$ точек $x^i(k),\ i = 1, \ldots, n+1$, которые являются вершинами выпуклого многогранника. Точки системы $x^i(k+1),\ i = 1, \ldots, n+1$, на ($k+1$)-й итерации совпадают с точками системы $x^i(k),\ i = 1, \ldots, n+1$, кроме $i = h$, где точка $x^h(k)$ – наихудшая в системе $x^i(k),\ i = 1, \ldots, n+1$, т.е. $f(x^h(k)) = \max\limits_{1 \le i \le n+1} f(x^i(k))$. Точка $x^h(k)$ заменяется на другую точку по специальным правилам, описанным ниже. В результате многогранники деформируются в зависимости от структуры линий уровня целевой функции, вытягиваясь вдоль длинных наклонных плоскостей, изменяя направление в изогнутых впадинах и сжимаясь в окрестности минимума. Построение последовательности многогранников заканчивается, когда значения функции в вершинах текущего многогранника отличаются от значения функции в центре тяжести системы $x^i(k),\ i = 1, \ldots, n+1;\ i \ne h$, не более чем на величину $\varepsilon > 0$.

Алгоритм

Шаг 1. Задать координаты вершин многогранника $x^1, \ldots, x^{n+1}$; параметры отражения α, сжатия β, растяжения γ; число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма. Положить $k = 0$ (последующие шаги 2–6 соответствуют текущему номеру k системы точек).

Шаг 2. Среди вершин найти «наилучшую» x^l и «наихудшую» x^h, соответствующие минимальному и максимальному значениям функции:

$$f\left(x^l\right) = \min_{j=1,\dots,n+1} f\left(x^j\right); \qquad f\left(x^h\right) = \max_{j=1,\dots,n+1} f\left(x^j\right),$$

а также точку x^s, в которой достигается второе по величине после максимального значение функции $f\left(x^s\right)$.

Шаг 3. Найти «центр тяжести» всех вершин многогранника, за исключением «наихудшей» x^h:

$$x^{n+2} = \frac{1}{n}\left[\sum_{j=1}^{n+1} x^j - x^h\right] = \frac{1}{n}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq h}}^{n+1} x^j .$$

Шаг 4. Проверить условие окончания:

а) если $\sigma = \left\{\frac{1}{n+1}\sum_{j=1}^{n+1}\left[f\left(x^j\right) - f\left(x^{n+2}\right)\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}} \le \varepsilon$, процесс поиска можно завершить и в качестве приближенного решения взять наилучшую точку текущего многогранника: $x^* \cong x^l$;

б) если $\sigma > \varepsilon$, продолжать процесс.

Шаг 5. Выполнить операцию *отражения* «наихудшей» вершины через центр тяжести x^{n+2} (рис. 6, *а*):

$$x^{n+3} = x^{n+2} + \alpha\left(x^{n+2} - x^h\right).$$

Шаг 6. Проверить выполнение условий:

а) если $f\left(x^{n+3}\right) \le f\left(x^l\right)$, выполнить операцию *растяжения* (рис. 6, *б*):

$$x^{n+4} = x^{n+2} + \gamma\left(x^{n+3} - x^{n+2}\right).$$

Найти вершины нового многогранника:

- если $f\left(x^{n+4}\right) < f\left(x^l\right)$, то вершина x^h заменяется на x^{n+4} (при $n = 2$ многогранник будет содержать вершины x^1, x^3, x^6). Затем следует положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2;
- если $f\left(x^{n+4}\right) \ge f\left(x^l\right)$, то вершина x^h заменяется на x^{n+3} (при $n = 2$ многогранник будет содержать вершины x^1, x^3, x^5). Далее следует положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2;

б) если $f\left(x^s\right) < f\left(x^{n+3}\right) \le f\left(x^h\right)$, то выполнить операцию *сжатия* (рис. 6, *в*):

$$x^{n+5} = x^{n+2} + \beta\left(x^h - x^{n+2}\right).$$

Заменить вершину x^h на x^{n+5}, положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2 (при $n = 2$ многогранник будет содержать вершины x^1, x^3, x^7);

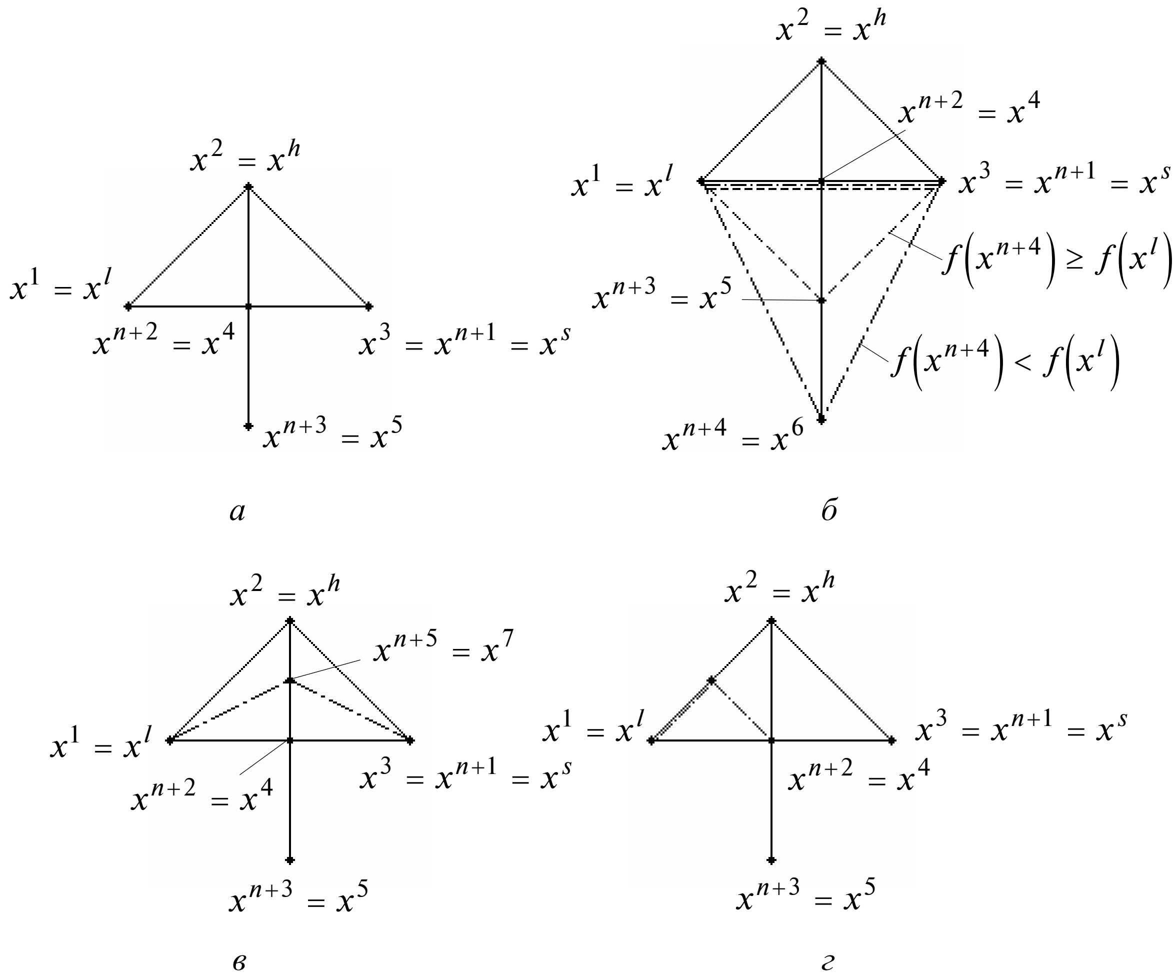


Рис. 6

в) если $f\left(x^l\right) < f\left(x^{n+3}\right) \le f\left(x^s\right)$, то вершину x^h заменить на x^{n+3}. При этом следует положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2;

г) если $f\left(x^{n+3}\right) > f\left(x^h\right)$, выполнить операцию *редукции* (рис. 6, *г*). Формируется новый многогранник с уменьшенными вдвое сторонами и вершиной x^l:

$$x^j = x^l + 0{,}5\left(x^j - x^l\right), \quad j = 1, \ldots, n+1.$$

При этом следует положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 2.

З а м е ч а н и е. Нелдер и Мид рекомендуют использовать параметры $\alpha = 1;\ \beta = 0{,}5;\ \gamma = 2$; Павиани (Paviani): $\alpha = 1$; $0{,}4 \le \beta \le 0{,}6$; $2{,}8 \le \gamma \le 3$; Паркинсон и Хатчинсон (Parkinson, Hutchinson): $\alpha = 2;\ \beta = 0{,}25;\ \gamma = 2{,}5$. В последнем случае в рамках операции отражения фактически выполняется растяжение.

Г. МЕТОДЫ СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА

Постановка задачи

Требуется найти безусловный минимум функции $f(x)$ многих переменных, т.е. найти такую точку $x^* \in R^n$, что $f(x^*) = \min\limits_{x \in R^n} f(x)$.

Г.1. Адаптивный метод случайного поиска

Стратегия поиска

Задается начальная точка x^0. Каждая последующая точка находится по формуле

$$x^{k+1} = x^k + t_k \xi^k,$$

где $t_k > 0$ – величина шага; ξ^k – случайный вектор единичной длины, определяющий направление поиска; k – номер итерации. На текущей итерации при помощи генерирования случайных векторов ξ^k получаются точки, лежащие на гиперсфере радиуса t_k с центром в точке x^k (рис. 7). Если значение функции в полученной точке не меньше, чем в центре, шаг считается неудачным (точки y^1, y^2 при поиске из x^0; y^1, y^3 при поиске из x^1). Если число неудачных шагов из текущей точки достигает некоторого числа M, дальнейший поиск продолжается из той же точки, но с меньшим шагом до тех пор, пока он не станет меньше заранее заданной величины R. Если же значение функции в полученной точке меньше, чем в центре, шаг считается удачным, и в найденном направлении делается увеличенный шаг, играющий роль ускоряющего шага (как при поиске по образцу в методе конфигураций). Если при этом значение функции снова меньше, чем в центре, направление считается удачным и дальнейший поиск продолжается из этой точки (точки $z^3 = x^1$ при поиске из x^0, $z^4 = x^2$ при поиске из x^1). Если же значение функции не стало меньше, чем в центре, направление считается неудачным и поиск продолжается из старого центра (в точке y^2 при поиске из x^1 функция меньше, чем в x^1, а в точке z^2 уже не меньше, поэтому направление $\left(z^2 - x^1\right)$ – неудачное).

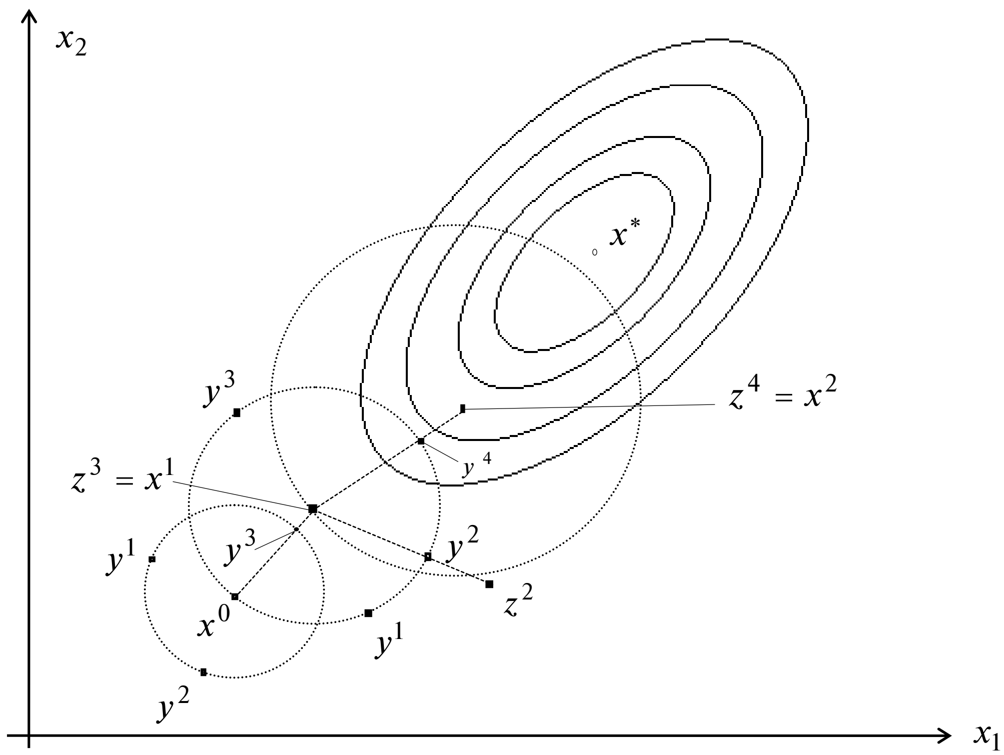


Рис. 7

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x^0, коэффициенты расширения $\alpha \geq 1$ и сжатия $0 < \beta < 1$, M – максимальное число неудачно выполненных испытаний на текущей итерации, $t_0 = 1$ – начальную величину шага, R - минимальную величину шага, N – максимальное число итераций. Положить $k = 0, j = 1$.

Шаг 2. Получить случайный вектор $\xi^j = \left(\xi_1{}^j, \ldots, \xi_n{}^j\right)^T$, где $\xi_i{}^j$ – случайная величина, равномерно распределенная на интервале $[-1,1]$.

Шаг 3. Вычислить $y^j = x^k + t_k \dfrac{\xi^j}{\left\|\xi^j\right\|}$.

Шаг 4. Проверить выполнение условий:

а) если $f\left(y^j\right) < f\left(x^k\right)$, шаг удачный. Положить $z^j = x^k + \alpha\left(y^j - x^k\right)$ и определить, является ли текущее направление $y^j - x^k$ удачным:

- если $f\left(z^j\right) < f\left(x^k\right)$, то направление поиска удачное. Положить $x^{k+1} = z^j$, $t_{k+1} = \alpha\, t_k$, $k = k + 1$ и проверить условие окончания. Если $k < N$, положить $j = 1$ и перейти к шагу 2. Если $k = N$, поиск завершить: $x^* \cong x^k$;
- если $f\left(z^j\right) \geq f\left(x^k\right)$, направление поиска неудачное, перейти к шагу 5;

б) если $f\left(y^j\right) \geq f\left(x^k\right)$, шаг неудачный и перейти к шагу 5.

Шаг 5. Оценить число неудачных шагов из текущей точки:

а) если $j < M$, следует положить $j = j + 1$ и перейти к шагу 2;

б) если $j = M$, проверить условие окончания:

- если $t_k \leq R$, процесс закончить: $x^* \cong x^k, f\left(x^*\right) \cong f\left(x^k\right)$;
- если $t_k > R$, положить $t_k = \beta\, t_k, j = 1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

1. Величина $\xi_i{}^j$, равномерно распределенная на интервале $[-1,1]$, генерируется обычно с помошью датчиков псевдослучайных чисел на ЭВМ. Вырабатывается случайная величина η_i^j, равномерно распределенная на $[0,1]$, а затем используется линейное преобразование: $\xi_i^j = 2\eta_i^j - 1$.

2. Шумер и Стейглиц (Schumer, Steiglitz) рекомендуют следующие параметры алгоритма: $\alpha = 1{,}618$; $\beta = 0{,}618$; $M = 3n$. При $\alpha = 1$ точка z^j на шаге 4 совпадает с y^j, т.е. аналог поиска по образцу не производится. Начальный шаг $t_0 \geq R$ можно задать произвольно.

3. Если выполнено условие окончания $t_k \leq R$, то в качестве ответа можно использовать любую точку внутри шара с радиусом t_k и центром в точке x^k.

Г.2. Метод случайного поиска с возвратом при неудачном шаге

Стратегия поиска

Задается начальная точка x^0. Каждая последующая точка находится по формуле

$$x^{k+1} = x^k + t_k\, \xi^k,$$

где $t_k > 0$ – величина шага; ξ^k – случайный вектор единичной длины, определяющий направление поиска; k – номер итерации. На текущей итерации при помощи генерирования случайных векторов ξ^k получаются точки, лежащие на гиперсфере радиуса t_k с центром в точке x^k (рис. 8). Если значение функции в полученной точке не меньше, чем в центре, шаг считается неудачным (точки y^1, y^2 при поиске из x^0; y^1, y^2, y^3 при поиске из x^1), происходит возврат в текущий центр и поиск продолжается. Если число неудачных шагов из текущей точки достигает некоторого числа M, дальнейший поиск продолжается из той же точки, но с меньшим шагом до тех пор, пока он не станет меньше заранее заданной величины R. Если же значение функции в полученной точке меньше, чем в центре, шаг считается удачным и дальнейший поиск продолжается из этой точки.

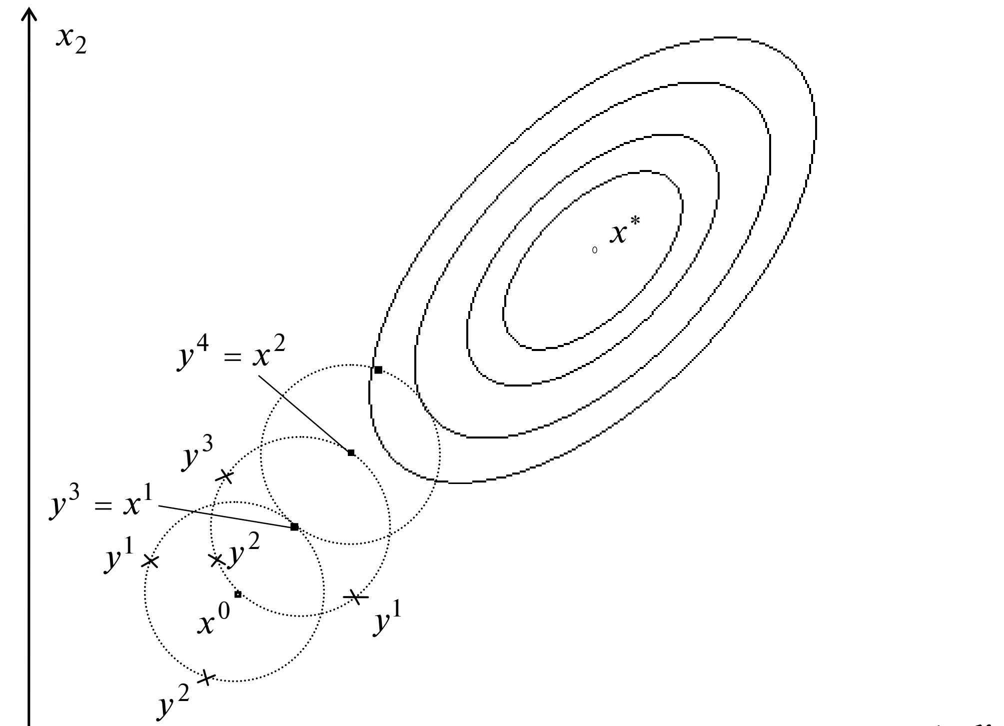


Рис. 8

Г.3. Метод наилучшей пробы

Стратегия поиска

Задается начальная точка x^0. Каждая последующая точка находится по формуле

$$x^{k+1} = x^k + t_k\,\xi^k,$$

где $t_k > 0$ – величина шага; ξ^k – случайный вектор единичной длины, определяющий направление поиска; k – номер итерации. На текущей итерации при помощи генерирования случайных векторов ξ^k получается M точек $y^1,\ldots,y^M$, лежащих на гиперсфере радиуса t_k с центром в точке x^k (рис. 9). Среди полученных точек выбирается точка y^m, в которой значение функции наименьшее. Если в выбранной точке значение функции меньше, чем в центре, то дальнейший поиск продолжается из этой точки. Иначе поиск продолжается из старого центра, но с меньшим шагом до тех пор, пока он не станет меньше заранее заданной величины R.

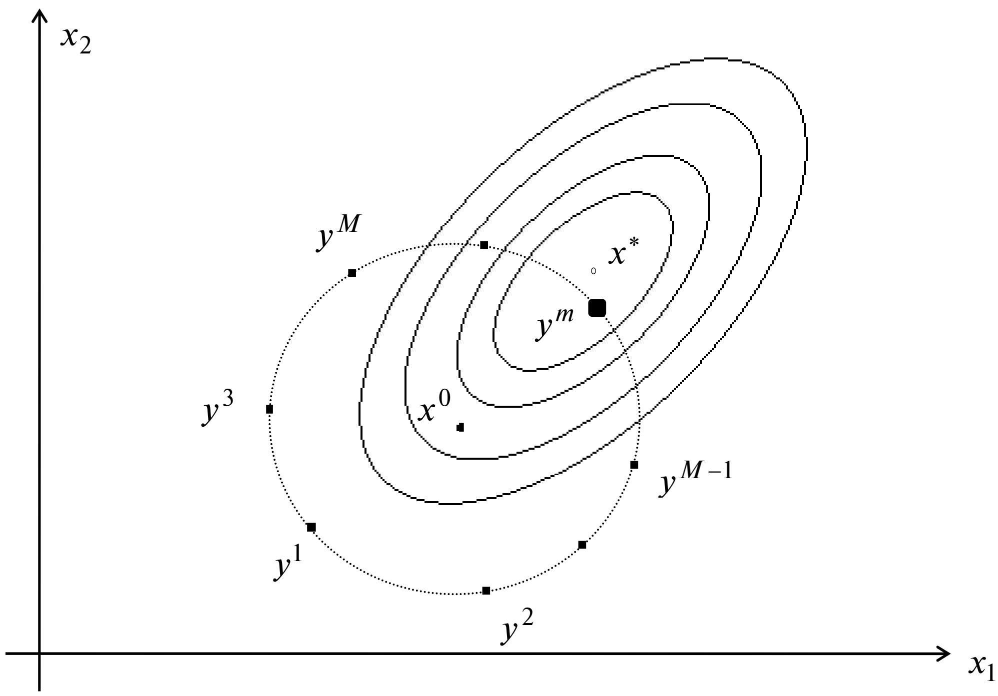


Рис. 9

Лекция 5

МЕТОДЫ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Постановка задачи

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

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

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

А. МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА С ПОСТОЯННЫМ ШАГОМ

Стратегия поиска

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\ldots$. Точки последовательности $\left\{x^k\right\}$ вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right),\ k = 0,1,\ldots ,$$

где точка x^0 задается пользователем; $\nabla f\left(x^k\right)$ – градиент функции $f(x)$, вычисленный в точке x^k; величина шага t_k задается пользователем и остается постоянной до тех пор, пока функция убывает в точках последовательности, что контролируется путем проверки выполнения условия $f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) < 0$ или $f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) < -\varepsilon \left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\|^2, 0 < \varepsilon < 1$.

Построение последовательности $\left\{x^k\right\}$ заканчивается в точке x^k, для которой $\left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\| < \varepsilon_1$, где ε_1 – заданное малое положительное число, или $k \ge M$, где M – предельное число итераций, или при двукратном одновременном выполнении двух неравенств $\left\| x^{k+1} - x^k \right\| < \varepsilon_2$, $\left| f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) \right| < \varepsilon_2$, где ε_2 – малое положительное число.

Вопрос о том, может ли точка x^k рассматриваться как найденное приближение искомой точки минимума, решается с помощью дополнительного исследования.

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

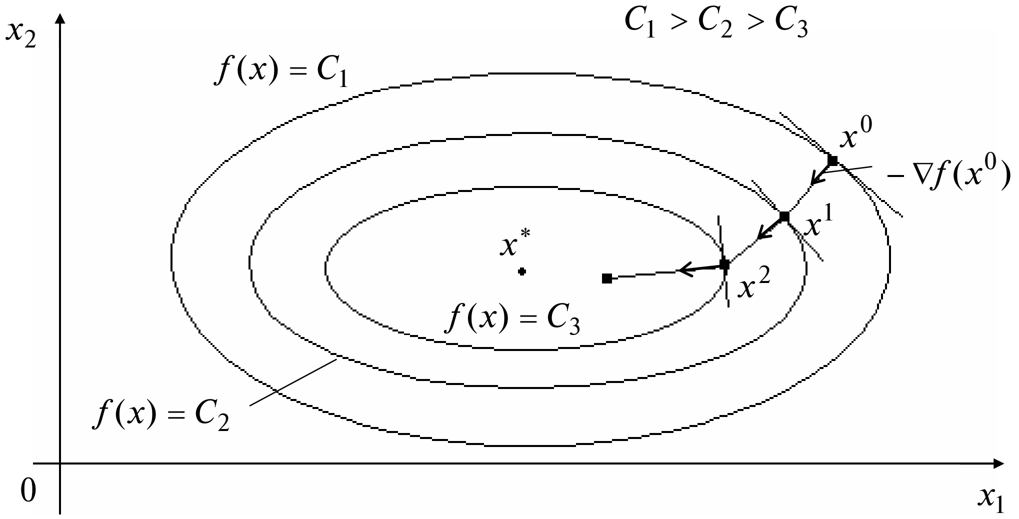


Рис. 1

З а м е ч а н и я.

1. Методы первого порядка при определенных условиях гарантируют сходимость последовательности $\{x^k\}$ к стационарной точке x^*, где $\nabla f(x^*) = 0$. Следовательно, найденная в результате применения метода точка x^* нуждается в дополнительном исследовании с целью ее классификации.

2. Условия окончания процесса поиска для большинства методов первого и второго порядков одни и те же (совпадают с применяемыми в методе А).

Б. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

Стратегия поиска

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, $k = 0,1,\ldots$. Точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - t_k \nabla f(x^k),$$

где точка x^0 задается пользователем; величина шага t_k определяется для каждого значения *k* из условия

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

Эта задача может решаться с использованием необходимого условия минимума $\frac{d\varphi}{dt_k} = 0$ и последующей проверкой достаточного условия минимума $\frac{d^2\varphi}{dt_k^{\,2}} > 0$. Другой путь связан с использованием численных методов, когда ищется $\min\limits_{t_k \in [a,b]} \varphi(t_k) = \min\limits_{t_k \in [a,b]} f\left(x^k - t_k \nabla f\left(x^k\right)\right)$ с помощью методом одномерной минимизации.

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

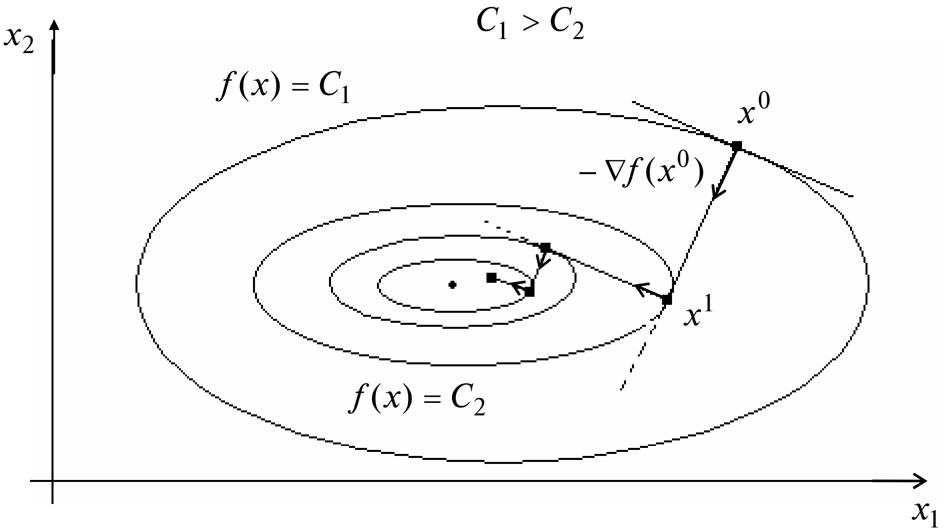


Рис. 2

В. МЕТОД ПОКООРДИНАТНОГО СПУСКА

Стратегия поиска

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\ldots$. Точки последовательности $\left\{x^k\right\}$ вычисляются по циклам в соответствии с правилом

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

где j – номер цикла вычислений; $j = 0,1,2,\ldots$; k – номер итерации внутри цикла, $k = 0,1,\ldots,n-1$; e_{k+1}, $k = 0,1,\ldots,n-1$ – единичный вектор, $(k+1)$-я проекция которого равна 1; точка x^{00} задается пользователем; величина шага t_k выбирается из условия

$$f\left(x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x = x^{jk}} \cdot e_{k+1}\right) - f\left(x^{jk}\right) < 0 \text{ или } f\left(x^{jk+1}\right) - f\left(x^{jk}\right) < -\varepsilon \left\| \nabla f\left(x^{jk}\right) \right\|^2.$$

Если выбранное условие при текущем t_k не выполняется, шаг уменьшается вдвое и точка $x^{jk} - t_k \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x = x^{jk}} \cdot e_{k+1}$ вычисляется заново. Легко видеть, что при фиксированном j за одну итерацию с номером k изменяется только одна проекция точки x^{jk}, имеющая номер $k+1$, а в течение всего цикла с номером j, т.е. начиная с $k = 0$ и кончая $k = n-1$, изменяются все n проекций точки x^{j0}. После этого точке x^{jn} присваивается номер $x^{j+1,0}$ и она берется за начальную точку для вычислений в $(j+1)$-м цикле.

Полученные в результате вычислений точки могут быть записаны как элементы последовательности $\{x^l\}$, где $l = n \cdot j + k$ – порядковый номер точки, т.е. $\{x^l\} = \{x^0 = x^{00}, x^1 = x^{01}, ..., x^n = x^{0n} = x^{10}, x^{n+1} = x^{11}, x^{n+2} = x^{12}, ...\}$.

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

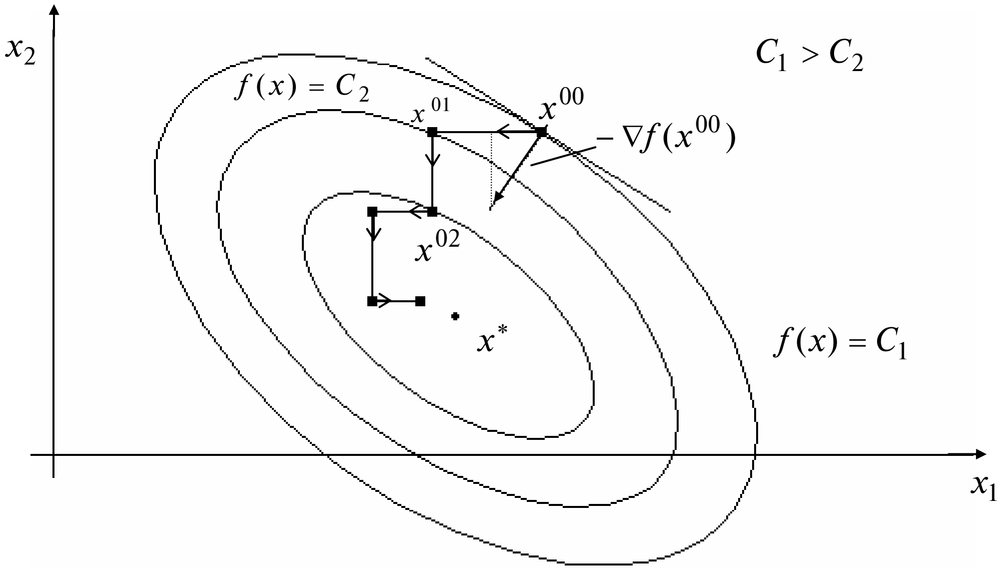


Рис. 3

Г. МЕТОД ГАУССА–ЗЕЙДЕЛЯ

Стратегия поиска

Стратегия метода Гаусса–Зейделя (Gauss–Seidel) состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\ldots$. Точки последовательности $\{x^k\}$ вычисляются по правилу

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

где j – номер цикла вычислений, $j = 0,1,2,\ldots$; k – номер итерации внутри цикла, $k = 0,1,\ldots,n-1$; e_{k+1} – единичный вектор, $(k+1)$-я проекция которого равна 1; точка x^{00} задается пользователем, величина шага t_k выбирается из условия

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

Данная задача является задачей одномерной минимизации функции $\varphi(t_k) = f\left(x^{jk} - t_k\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_{k+1}}\right)_{x=x^{jk}} \cdot e_{k+1}\right)$ и может быть решена либо с использованием условий $\frac{d\varphi}{dt_k} = 0$, $\frac{d^2\varphi}{dt_k^{\,2}} > 0$, либо численно с использованием методов одномерной минимизации, как задача $\varphi(t_k) \to \min\limits_{t_k \in [a,b]}$.

При фиксированном j за одну итерацию с номером k изменяется только одна проекция точки x^{jk}, имеющая номер $k+1$, а в течение всего цикла с номером j, т.е. начиная с $k=0$ и кончая $k = n-1$, изменяются все n проекций точки x^{j0}. После этого точке x^{jn} присваивается номер $x^{j+1,0}$ и она берется за начальную точку для вычислений в $(j+1)$-м цикле.

Полученные в результате вычислений точки могут быть записаны как элементы последовательности $\left\{x^l\right\}$, где $l = n \cdot j + k$ – порядковый номер точки, т.е. $\left\{x^l\right\} = \left\{x^0 = x^{00}, x^1 = x^{01}, ..., x^n = x^{0n} = x^{10}, x^{n+1} = x^{11}, x^{n+2} = x^{12}, ...\right\}$.

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

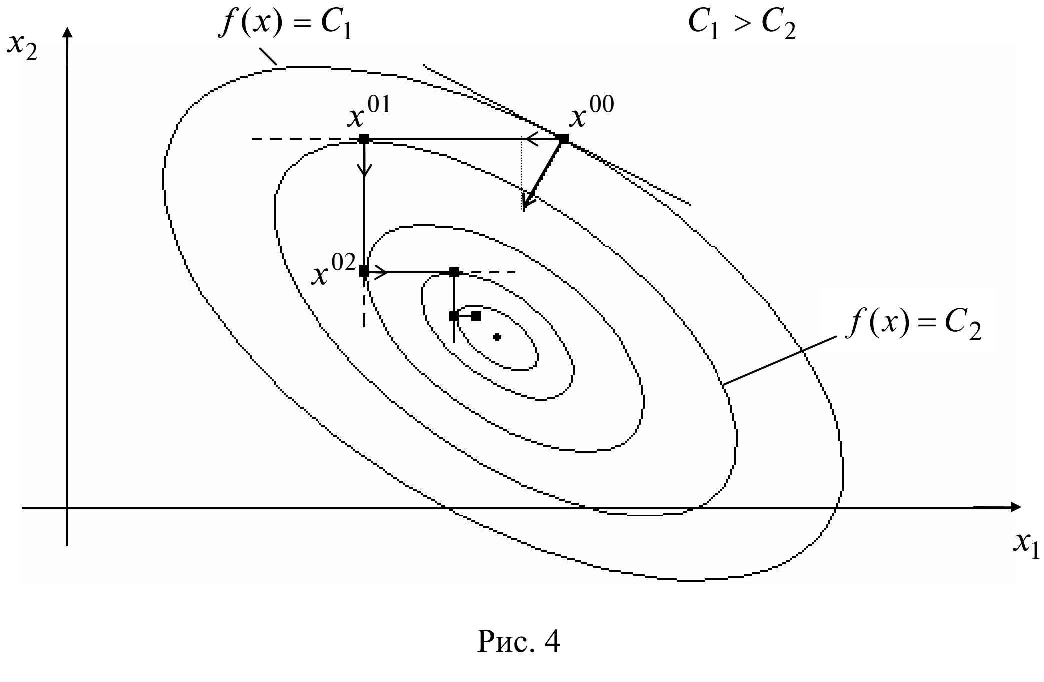


Рис. 4

Д. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА–РИВСА

Стратегия поиска

Стратегия метода Флетчера–Ривса (Fletcher–Reeves) состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\ldots$. Точки последовательности $\left\{x^k\right\}$ вычисляются по правилу:

$$x^{k+1} = x^k + t_k\, d^k,\; k = 0,1,\ldots;$$

$$d^0 = -\nabla f\left(x^0\right);\quad d^k = -\nabla f\left(x^k\right) + \beta_{k-1} d^{k-1},\; k \ge 1;$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\left\| \nabla f\left(x^k\right) \right\|^2}{\left\| \nabla f\left(x^{k-1}\right) \right\|^2}.$$

Точка x^0 задается пользователем, величина шага t_k определяется для каждого значения *k* из условия $\varphi(t_k) = f\left(x^k + t_k d^k\right) \to \min\limits_{t_k}$.

Решение задачи одномерной минимизации может осуществляться либо из условия $\frac{d\varphi}{dt_k} = 0$, $\frac{d^2\varphi}{dt_k{}^2} > 0$, либо численно с использованием методов одномерной минимизации, когда решается задача $\varphi\left(t_k\right) \to \min\limits_{t_k \in [a,b]}$.

Для квадратичных функций $f(x)$ с матрицей Гессе $H > 0$ метод Флетчера–Ривса сходится к точке минимума за число шагов, не превышающее n – размерность вектора x.

Для неквадратичных функций, как правило, используется *алгоритм Полака–Рибьера* (Polak–Ribiere), когда величина β_{k-1} вычисляется следующим образом:

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

где $J = \{0, n, 2n, \ldots\}$. В отличие от алгоритма Флетчера–Ривса алгоритм Полака–Рибьера предусматривает использование итерации наискорейшего градиентного спуска через каждые n шагов. Геометрическая интерпретация метода для $n = 2$ изображена на рис. 5.

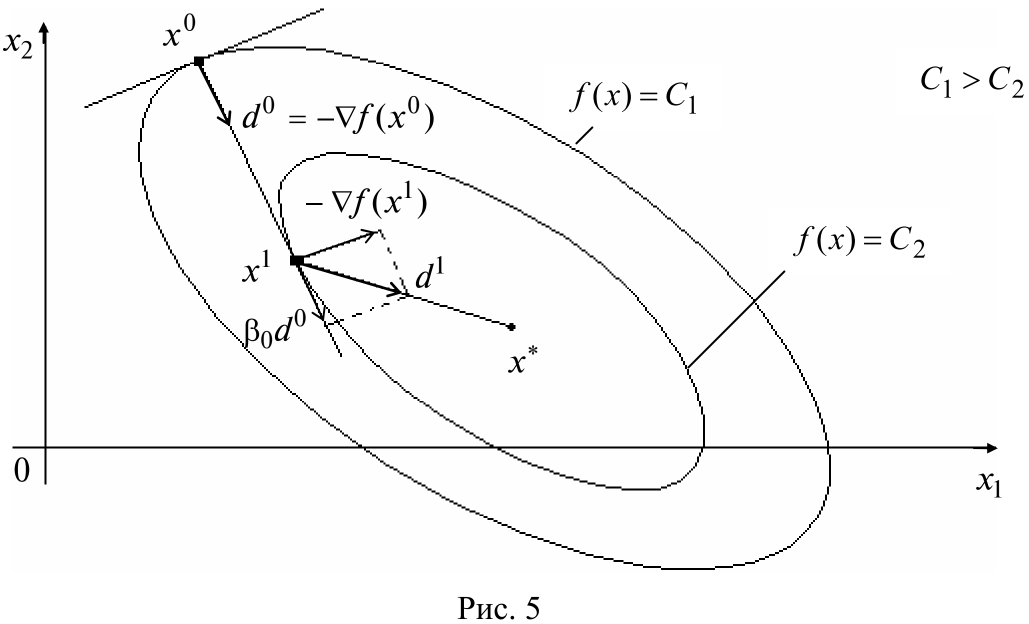


Рис. 5

МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

А. МЕТОД НЬЮТОНА

Стратегия поиска

Стратегия метода Ньютона (Newton) состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}, k = 0,1,\dots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\dots$. Точки последовательности вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right), \quad k = 0,1,\dots ,$$

где x^0 – задается пользователем, а направление спуска d^k определяется для каждого значения *k* по формуле $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$, величина шага $t_k = 1$.

З а м е ч а н и е. Для квадратичных функций при определенных условиях [1,2] метод сходится к стационарной точке за одну итерацию.

Б. МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА

Стратегия поиска

Стратегия метода Ньютона–Рафсона (Newton–Raphson) состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}, k = 0,1,\dots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\dots$. Точки последовательности вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - t_k\, H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right), \quad k = 0,1,\dots ,$$

где x^0 задается пользователем, а величина шага t_k определяется из условия

$$\varphi(t_k) = f\left(x^k - t_k\, H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)\right) \to \min_{t_k}.$$

Эта задача может решаться либо аналитически с использованием необходимого условия минимума $\frac{d\varphi}{dt_k} = 0$ и последующей проверкой достаточного условия $\frac{d^2\varphi}{d\,t_k^{\,2}} > 0$, либо численно как задача $\varphi\left(t_k\right) \to \min\limits_{t_k \in \left[a,b\right]}$, где интервал $\left[a,b\right]$ задается пользователем.

З а м е ч а н и е. Для уменьшения числа обращений матрицы Гессе применяется *упрощенный метод Ньютона*, в котором обращение осуществляется один раз – в начальной точке x^0:

$$x^{k+1} = x^k - t_k H^{-1}\left(x^0\right) \nabla f\left(x^k\right), k = 0, 1, \ldots .$$

В. МЕТОД МАРКВАРДТА

Стратегия поиска

Стратегия метода Марквардта (Marquardt) состоит в построении последовательности точек $\left\{x^k\right\}$, $k = 0,1,\ldots$, таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, $k = 0,1,\ldots$. Применяется в случаях, когда на какой-либо итерации (итерациях) выполняется условие $\det H(x^k) \approx 0$, что приводит к значительным погрешностям вычисления обратной матрицы.

Точки последовательности $\left\{x^k\right\}$ вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - \left[H\left(x^k\right) + \mu^k E\right]^{-1} \nabla f\left(x^k\right),\ k = 0,1,\ldots ,$$

где точка x^0 задается пользователем, E – единичная матрица, μ^k – последовательность положительных чисел, таких, что матрица $\left[H\left(x^k\right) + \mu^k E\right]^{-1}$ положительно определена.

Как правило, число μ^0 назначается как минимум на порядок больше, чем самый большой элемент матрицы $H\left(x^0\right)$, а в ряде стандартных программ полагается $\mu^0 = 10^4$. Если $f\left(x^k - \left(H\left(x^k\right) + \mu^k E\right)^{-1} \nabla f\left(x^k\right)\right) < f\left(x^k\right)$, то $\mu^{k+1} = \dfrac{\mu^k}{2}$. В противном случае $\mu^{k+1} = 2\mu^k$. Легко видеть, что алгоритм Марквардта в зависимости от величины μ^k на каждом шаге по своим свойствам приближается либо к алгоритму Ньютона, либо к алгоритму градиентного спуска.

Лекция 6

5. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА УСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

А. МЕТОД ШТРАФОВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f\left(x_1,\ldots,x_n\right)$ и функции ограничений $g_j(x) = 0$, $j = 1,\ldots,m$; $g_j(x) \le 0$, $j = m+1,\ldots,p$, определяющие множество допустимых решений *X*.

Требуется найти локальный минимум целевой функции на множестве *X*, т.е. такую точку $x^* \in X$, что

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; \begin{array}{ll} g_j(x) = 0, & j = 1,\ldots,m; \quad m < n \\ g_j(x) \le 0, & j = m+1,\ldots,p \end{array} \right\}.$

Стратегия поиска

Идея метода заключается в сведении задачи на условный минимум к решению последовательности задач поиска безусловного минимума *вспомогательной функции*:

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + P\left(x, r^k\right) \to \min_{x \in R^n},$$

где $P\left(x, r^k\right)$ – *штрафная функция*, r^k – параметр штрафа, задаваемый на каждой *k*-й итерации. Это связано с возможностью применения эффективных и надежных методов поиска безусловного экстремума.

Штрафные функции конструируются, исходя из условий:

$$P\left(x, r^k\right) = \begin{cases} 0, & \text{при выполнении ограничений,} \\ > 0, & \text{при невыполнении ограничений,} \end{cases}$$

причем при невыполнении ограничений и $r^k \to \infty$, $k \to \infty$ справедливо $P(x, r^k) \to \infty$.

Чем больше r^k, тем больше штраф за невыполнение ограничений. Как правило, для ограничений типа равенств используется квадратичный штраф, а для ограничений типа неравенств – квадрат срезки:

$$P\left(x, r^k\right) = \frac{r^k}{2} \left\{ \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 + \sum_{j=m+1}^{p} [g_j^+(x)]^2 \right\},$$

где $g_j^+(x)$ – *срезка функции*:

$$g_j^+(x) = \max\{\ 0, g_j(x)\ \} = \begin{cases} g_j(x), & g_j(x) > 0, \\ 0, & g_j(x) \le 0. \end{cases}$$

Начальная точка поиска задается обычно вне множества допустимых решений X. На каждой k-й итерации ищется точка $x^*\left(r^k\right)$ минимума вспомогательной функции $F\left(x, r^k\right)$ при заданном параметре r^k с помощью одного из методов безусловной минимизации. Полученная точка $x^*\left(r^k\right)$ используется в качестве начальной на следующей итерации, выполняемой при возрастающем значении параметра штрафа. При неограниченном возрастании r^k последовательность точек $x^*\left(r^k\right)$ стремится к точке условного минимума x^*.

З а м е ч а н и я.

1. Так как сходимость метода обеспечивается при $r^k \to \infty$, то возникает вопрос о том, нельзя ли получить решение исходной задачи в результате однократного поиска безусловного минимума вспомогательной функции с параметром r^k, равным большому числу, например 10^{20}. Однако такая замена последовательного решения вспомогательных задач не представляется возможной, так как с ростом r^k функция $F\left(x, r^k\right)$ приобретает ярко выраженную «овражную» структуру.

2. Точки $x^*(r^k)$ в алгоритме – это точки локального минимума функции $F\left(x, r^k\right)$. Однако функция $F\left(x, r^k\right)$ может быть неограниченной снизу и процедуры методов безусловной минимизации могут расходиться. Эти обстоятельства необходимо учитывать при программной реализации.

3. Обычно выбирается $r^0 = 0{,}01; 0{,}1; 1$, $C \in [4, 10]$, а $r^{k+1} = Cr^k$. Иногда начинают с $r^0 = 0$, т.е. с задачи поиска безусловного минимума.

4. При решении задач процедура расчетов завершается при некотором конечном значении параметра штрафа r^k. При этом приближенное решение, как правило, не лежит в множестве допустимых решений, т.е. ограничения задачи не выполняются. Это является одним из недостатков метода. С ростом параметра штрафа r^k генерируемые алгоритмом точки приближаются к решению исходной задачи извне множества допустимых решений. Поэтому обсуждаемый метод иногда называют *методом внешних штрафов*.

5. На практике для получения решения исходной задачи с требуемой точностью достаточно бывает решить конечное (относительно небольшое) число вспомогательных задач. При этом нет необходимости решать их точно, а информацию, полученную в результате решения очередной вспомогательной задачи, обычно удается эффектно использовать для решения следующей.

Б. МЕТОД БАРЬЕРНЫХ ФУНКЦИЙ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x)=f\left(x_1,\dots,x_n\right)$ и функции ограничений-неравенств $g_j(x)\le 0$, $j=1,\dots,m$, определяющие множество допустимых решений *X*.

Требуется найти локальный минимум целевой функции на множестве X, т.е. такую точку $x^* \in X$, что

$$f(x^*)=\min_{x\in X} f(x),$$

где $X=\left\{\ x \ \middle|\ g_j(x)\le 0,\ j=1,\dots,m\ \right\}$.

Стратегия поиска

Идея метода заключается в сведении задачи на условный минимум к решению последовательности задач поиска безусловного минимума *вспомогательной функции* $F\left(x,r^k\right)=f(x)+P\left(x,r^k\right)$, где $P\left(x,r^k\right)$ – штрафная функция, $r^k\ \ge 0$ – параметр штрафа.

Как правило, используются:

а) *обратная штрафная функция* $P\left(x,r^k\right)=-\,r^k\sum\limits_{j=1}^{m}\dfrac{1}{g_j(x)}$;

б) *логарифмическая штрафная функция* $P\left(x,r^k\right)=-r^k\sum\limits_{j=1}^{m}\ln\left[-g_j(x)\right]$

Обе штрафные функции определены и непрерывны внутри множества *X*, т.е. на множестве $\left\{\ x \ \middle|\ g_j(x)<0,\ j=1,\dots,m\right\}$, и стремятся к бесконечности при приближении к границе множества изнутри. Поэтому они называются *барьерными функциями*. При $r^k>0$ штрафная функция, задаваемая обратной функцией, положительна. Логарифмическая штрафная функция положительна при $-1<g(x)<0$ и отрицательна при $g(x)<-1$, т.е. внутренним точкам области отдается предпочтение перед граничными точками.

Начальная точка задается только внутри множества *X*. На каждой *k*-й итерации ищется точка $x^*(r^k)$ минимума вспомогательной функции $F\left(x,r^k\right)$ при заданном параметре r^k с помощью одного из методов безусловной минимизации. Полученная точка $x^*(r^k)$ используется в качестве начальной на следующей итерации, выполняемой при уменьшающемся значении параметра штрафа. При $r^k\to +0$ последовательность точек $x^*(r^k)$ стремится к точке условного минимума x^*. Барьерные функции как бы препятствуют выходу из множества *X*, а если решение задачи лежит на границе, то процедура метода приводит к движению изнутри области к границе.

Заметим, что согласно описанной процедуре точки $x^*(r^k)$ лежат внутри множества допустимых решений для каждого r^k. Этим объясняется то, что метод барьерных функций иногда называется *методом внутренних штрафов*.

З а м е ч а н и я.

1. Обычно выбирается $r^0 = 1, 10, 100$, параметр $C = 10; 12; 16$, а $r^{k+1} = \dfrac{r^k}{C}$.

2. При $r^k \to +0$ обеспечивается сходимость, однако с уменьшением r^k функция $F\left(x, r^k\right)$ становится все более «овражной». Поэтому полагать r^k малым числом сразу нецелесообразно.

В. КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f\left(x_1, \ldots, x_n\right)$ и функции ограничений $g_j(x) = 0$, $j = 1, \ldots, m$; $g_j(x) \le 0$, $j = m+1, \ldots, p$, определяющие множество допустимых решений X.

Требуется найти локальный минимум целевой функции на множестве X, т.е. такую точку $x^* \in X$, что

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; \begin{array}{ll} g_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, m; \quad m < n \\ g_j(x) \le 0, & j = m+1, \ldots, p \end{array} \right\}.$

Стратегия поиска

Для ограничений типа равенств применяется метод штрафов (внешних штрафов), а для ограничений-неравенств – метод барьерных функций (внутренних штрафов).

Задача на условный минимум сводится к решению последовательности задач поиска минимума *смешанной вспомогательной функции*:

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^{p} \frac{1}{g_j(x)}$$

или

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^{p} \ln[-g_j(x)],$$

где $r^k \ge 0$ – параметр штрафа.

Начальная точка задается так, чтобы ограничения-неравенства строго выполнялись: $g_j(x) < 0$, $j = m+1, \ldots, p$. На каждой k-й итерации ищется точка $x^*(r^k)$ минимума смешанной вспомогательной функции при заданном параметре r^k с помощью одного из методов безусловной минимизации. Полученная точка $x^*(r^k)$ используется в качестве начальной на следующей итерации, выполняемой при уменьшающемся значении параметра штрафа. При $r^k \to +0$ последовательность точек $x^*(r^k)$ стремится к точке условного минимума x^*.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x^0 так, чтобы $g_j(x) < 0$, $j = m+1, \ldots, p$; начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$; число $C > 1$ для уменьшения параметра штрафа; малое число ε для остановки алгоритма. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Составить смешанную вспомогательную функцию:

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^{p} \frac{1}{g_j(x)} = f(x) + P\left(x, r^k\right)$$

или

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + \frac{1}{2r^k} \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 - r^k \sum_{j=m+1}^{p} \ln[-g_j(x)] = f(x) + P\left(x, r^k\right).$$

Шаг 3. Найти точку $x^*(r^k)$ минимума функции $F\left(x, r^k\right)$ с помощью какого-либо метода поиска безусловного минимума с проверкой выполнения справедливости неравенств: $g_j(x) < 0$, $j = m+1, \ldots, p$. При этом задать все требуемые выбранным методом параметры. В качестве начальной точки взять x^k.

Шаг 4. Вычислить $P\left(x^*(r^k), r^k\right)$ и проверить условие окончания:

а) если $\left|P\left(x^*(r^k), r^k\right)\right| \le \varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^* = x^*(r^k), \quad f(x^*) = f\left(x^*(r^k)\right);$$

б) если $\left|P\left(x^*(r^k), r^k\right)\right| > \varepsilon$, то положить $r^{k+1} = \dfrac{r^k}{C}$, $x^{k+1} = x^*(r^k)$, $k = k+1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

1. Метод предложен Фиакко и Мак-Кормиком (Fiacco, McCormick). Они рекомендуют $r^0 = 1$, $C = 4$.

2. Можно использовать разные параметры штрафа для внешних и внутренних штрафов.

Лекция 7

6. ЗАДАЧИ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

А. СИМПЛЕКС-МЕТОД ДАНЦИГА

А1. Решение канонической задачи

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \ i = 1,\ldots,m; \ \ m < n,$$

$$x_j \geq 0, \ j = 1,\ldots,n.$$

Задача называется *канонической*, а искомое решение $x^* = (x_1^*,\ldots,x_n^*)^T$ – *оптимальным*.

З а м е ч а н и я.

1. Максимизируемая функция и ограничения линейны по x_j, $j = 1,\ldots,n$.

2. Задача содержит ограничения на неотрицательность переменных, присутствие которых диктуется процедурой описанного ниже симплекс-метода.

3. Будем считать, что в ограничениях все числа $b_i \geq 0$, $i = 1,\ldots,m$. Этого можно добиться, умножая ограничения, где $b_i < 0$, на “-1”.

Стратегия поиска

Стратегия метода Данцига (Dantzig) решения задачи основана на особенностях постановки этой задачи. Множество

$$X = \left\{ x \,\middle|\, \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i; \quad i = 1,\ldots,m; \quad x \in R^n; \quad x_j \geq 0; \ j = 1,\ldots,n \right\}$$

допустимых решений задачи, определяемое ограничениями, есть выпуклое множество, которое геометрически представляет собой выпуклый политоп, имеющий конечное число крайних точек.

Крайней точкой выпуклого множества X называется точка $x \in X$, которая не может быть выражена в виде выпуклой комбинации других точек $y \in X$, $x \neq y$.

Классический метод Гаусса–Жордана решения систем линейных уравнений состоит в приведении их к виду

$$x_1 \qquad + \bar{a}_{1m+1} x_{m+1} + \ldots + \bar{a}_{1s} x_s + \ldots + \bar{a}_{1n} x_n = \bar{b}_1,$$

$$\ldots$$

$$x_k \quad + \bar{a}_{km+1} x_{m+1} + \ldots + \bar{a}_{ks} x_s + \ldots + \bar{a}_{kn} x_n = \bar{b}_k,$$

$$\ldots$$

$$x_m + \bar{a}_{mm+1} x_{m+1} + \ldots + \bar{a}_{ms} x_s + \ldots + \bar{a}_{mn} x_n = \bar{b}_m.$$

Переменные $x_1, \ldots, x_m$, входящие только в одно из уравнений системы с коэффициентами 1, а во все остальные уравнения с коэффициентами, равными нулю, называются *базисными*, в то время как остальные $n - m$ переменных называются *небазисными* (*свободными*). *Базисным решением* системы называется решение

$$x_i = \bar{b}_i, \; i = 1, \ldots, m; \quad x_{m+1} = \ldots = x_n = 0.$$

Базисное решение называется *допустимым*, если $x_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, m$. Базисное решение называется *невырожденным*, если $x_i > 0$, $i = 1, \ldots, m$.

Множество крайних точек политопа *X*, определяемого ограничениями, соответствует множеству допустимых базисных решений системы, и при этом одному базисному решению соответствует одна крайняя точка.

Утверждение. *Если функция $f(x)$ в канонической задаче достигает максимума на политопе X, определяемом ограничениями, то она достигает его по крайней мере в одной крайней точке этого политопа. Если она достигает его в нескольких крайних точках, то она достигает его на любой выпуклой комбинации этих крайних точек.*

Теорема определяет стратегию решения задачи, реализованную с помощью симплекс-метода, – это направленный перебор базисных решений, определяющих крайние точки политопа. Направленность перебора предполагает следующую организацию вычислительного процесса.

1. Нахождение начального базисного решения.

2. Переход от одного базисного решения к другому таким образом, чтобы обеспечить возрастание $f(x)$.

А2. Решение основной задачи

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \geq b_i, \quad i = 1, \ldots, m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leq b_i, \quad i = m+1, \ldots, p;$$

$$x_j \geq 0, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Данная задача линейного программирования называется *основной*. Предполагается, что $b_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, p$.

Стратегия поиска

Для решения основной задачи симплекс-методом она должна быть приведена к канонической задаче путем введения в каждое ограничение по одной дополнительной переменной: в каждое ограничение-неравенство со знаком «$\le$» вводится дополнительная переменная со знаком «$+$» (она становится базисной), а в каждое ограничение-неравенство со знаком «$\ge$» вводится дополнительная переменная со знаком «–».

Каноническая задача записывается следующим образом:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - x_{n+i} = b_i, \qquad i = 1, \dots, m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j + \underline{x_{n+i}} = b_i, \qquad i = m+1, \dots, p;$$

$$x_1 \ge 0, \dots, x_{n+p} \ge 0.$$

Так как в общем случае в уравнениях нет базисных переменных, то для того, чтобы можно было применить симплекс-метод, делается переход к M-задаче. В каждое из m уравнений вводится искусственная переменная со знаком «$+$» (она становится базисной), а к целевой функции добавляется сумма искусственных переменных, умноженная на «$-M$». В результате получаем задачу в расширенной форме:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j - M \sum_{i=1}^{m} x_{n+p+i} \to \max,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - x_{n+i} + \underline{x_{n+p+i}} = b_i, \quad i = 1, \dots, m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j + \underline{x_{n+i}} = b_i, \qquad i = m+1, \dots, p;$$

$$x_1 \ge 0, \dots, x_{n+p+m} \ge 0.$$

З а м е ч а н и я.

Если решается задача поиска минимума целевой функции, то при переходе к M-задаче перед числом M ставится знак «$+$».

Б. ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ

В случае двух переменных задача линейного программирования имеет простую геометрическую интерпретацию и может быть решена графически с помощью следующего алгоритма.

Алгоритм

1. Построить множество допустимых решений. В общем случае оно представляет собой выпуклый многоугольник. Если ограничения в задаче несовместны, множество допустимых решений является пустым множеством, а задача поиска экстремума не имеет смысла.
2. Найти градиент целевой функции. В силу ее линейности градиент постоянен и может быть построен в любой точке координатной плоскости (как правило, он строится в начале координат).
3. Провести линию уровня функции, перпендикулярную градиенту.
4. Передвигать линию уровня параллельно самой себе до касания с множеством допустимых решений. Точки касания являются точками экстремума.
5. Классифицировать точки касания с использованием свойств градиента.

В случае непустого множества допустимых решений возможны три типовые ситуации:

а) задача имеет *единственное решение* (линия уровня касается множества допустимых решений в одной точке);

б) задача имеет *бесконечное множество решений* (линия уровня касается множества допустимых решений вдоль стороны многоугольника);

в) задача *не имеет решения* (множество допустимых решений не ограничено).

Заметим, что графически можно решать и задачи с ограничениями типа равенств, если число ограничений на единицу или на два меньше числа переменных. Способ решения: сведение к задаче с одной или двумя переменными соответственно. Для этого следует выразить целевую функцию и базисные переменные через свободные и воспользоваться условием неотрицательности, типичным для задач линейного программирования. Далее необходимо пользоваться приведенным алгоритмом графического решения задач линейного программирования.

Пример. Решить графически следующие задачи линейного программирования:

а) $f(x) = -x_1 + x_2 \to \text{extr}$, б) $f(x) = x_1 \to \text{extr}$, в) $f(x) = -x_1 - x_2 \to \text{extr}$,

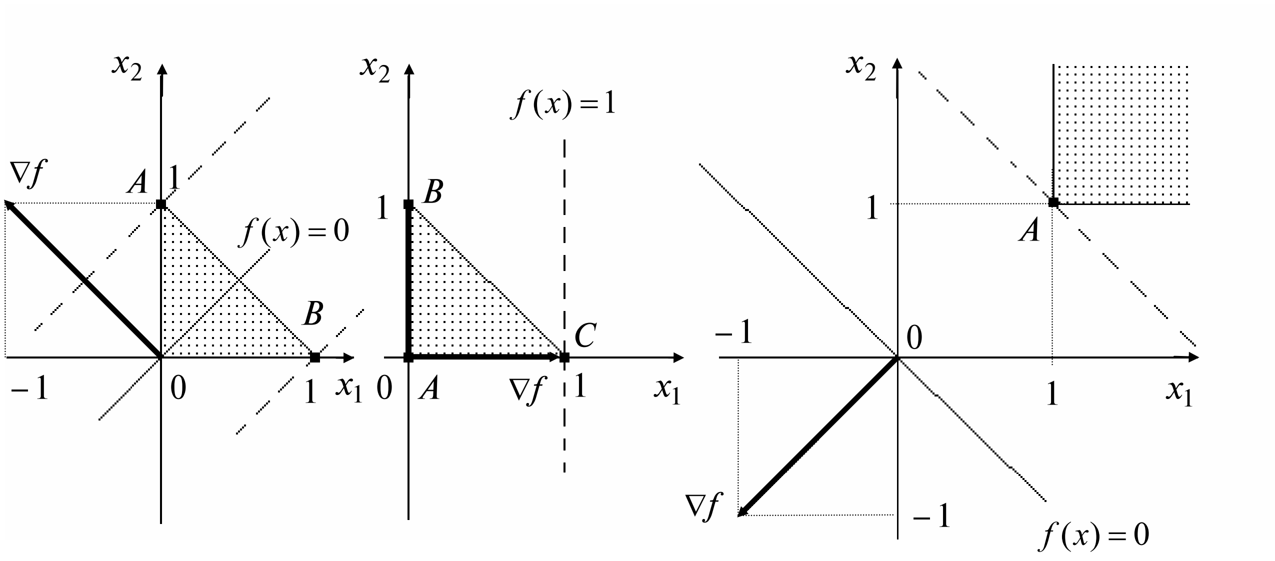
$x_1 + x_2 \le 1$, $x_1 + x_2 \le 1$, $x_1 \ge 1$, $x_2 \ge 1$.

$x_1 \ge 0$, $x_2 \ge 0$; $x_1 \ge 0$, $x_2 \ge 0$;

☐ Воспользуемся приведенным алгоритмом графического решения задач линейного программирования.

В задаче «а» в точке $A = (0; 1)^T$ достигается максимум, а в точке $B = (1; 0)^T$ – минимум. Очевидно, и минимум, и максимум единственные.

В задаче «б» в точке $C = (1; 0)^T$ достигается максимум, а на отрезке AB – минимум, т.е. имеется бесконечное множество решений.



а *б* *в*

Рис. 1

В задаче «в» в точке $A = (1; 1)^T$ достигается максимум, а минимума нет, так как множество допустимых решений в направлении антиградиента (наискорейшего убывания функции) неограниченное. ■

7. ЗАДАЧИ ЛИНЕЙНОГО ЦЕЛОЧИСЛЕННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ. МЕТОД ВЕТВЕЙ И ГРАНИЦ

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i, \quad i = 1, \ldots, m;$$

$$x_j \ge 0, \text{ целые}, \; j = 1, \ldots, n.$$

Задача называется *задачей линейного целочисленного программирования*.

Стратегия поиска

Задача решается симплекс-методом без учета ограничений на целочисленность переменных (эта задача обозначается ЗЛП-0). Считается, что она имеет решение. На оптимальном решении $x^{0*}=(x_1^{0*},\ldots,x_n^{0*})^T$ вычисляется значение целевой функции $f\left(x^{0*}\right)$.

Если решение x^{0*} является целочисленным, то поставленная задача решена. Если решение x^{0*} оказывается нецелочисленным, то значение $f(x^{0*})$ является верхней границей возможных оптимальных значений $f(x)$ на целочисленных решениях. При нецелочисленном решении дальнейшая процедура решения задачи состоит в ее *ветвлении* на две: ЗЛП-1 и ЗЛП-2 (рис.2). Целью этого ветвления является разбиение множества допустимых решений, определяемого ограничениями, на два подмножества путем формирования дополнительных ограничений таким образом, чтобы исключить нецелочисленную точку x^{0*} и сделать решение, по крайней мере одной из задач, целочисленным по одной выбранной координате x_k.

Координатой x_k может быть:

- нецелочисленная координата с наименьшим или наибольшим индексом;
- нецелочисленная координата с наименьшей или наибольшей дробной частью;
- нецелочисленная координата, которой соответствует наибольший коэффициент в целевой функции;
- нецелочисленная координата, выбранная на основании приоритетов, определяемых физическим содержанием задачи.

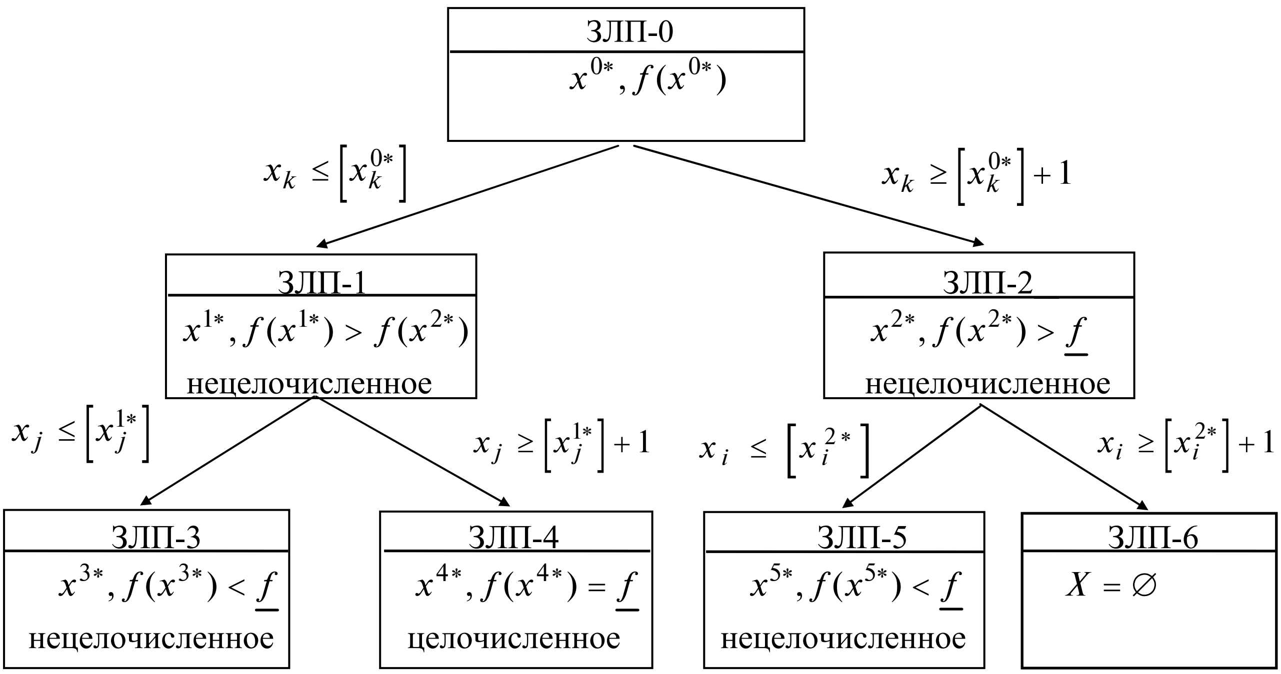


Рис. 2

Для формирования дополнительных ограничений выделяется целая часть $\left[x_k^{0*}\right]$ значения координаты x_k^{0*}. Дополнительные ограничения имеют вид $x_k \le \left[x_k^{0*}\right]$, $x_k \ge \left[x_k^{0*}\right] + 1$.

Задачи ЗЛП-1 и ЗЛП-2 записываются в следующем виде:

ЗЛП-1	**ЗЛП-2**
$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max$,	$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max$,
$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i$, $i = 1,\dots,m$,	$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i$, $i = 1,\dots,m$,
$x_k \le \left[x_k^{0*}\right]$,	$x_k \ge \left[x_k^{0*}\right] + 1$,
$x_j \ge 0$, $j = 1,\dots,n$;	$x_j \ge 0$, $j = 1,\dots,n$.

Формирование дополнительных ограничений позволило исключить из рассмотрения оптимальное нецелочисленное решение x^{0*} и обеспечить целочисленность значений координаты x_k.

Задачи ЗЛП-1 и ЗЛП-2 решаются самостоятельно симплекс-методом без учета требований на целочисленность значений координат x_j, $j = 1,\dots,n$. Вычисляются значения функции $f(x)$ на оптимальных решениях обеих задач. Если ни одна из них не имеет целочисленного решения, то выбирается задача для приоритетного дальнейшего ветвления по установленному правилу: например приоритетному ветвлению подлежит та задача, в которой значение $f(x)$ на оптимальном нецелочисленном решении максимально. Допустим, что $f\left(x^{1*}\right) > f\left(x^{2*}\right)$ и задача ЗЛП-1 первой ветвится на ЗЛП-3 и ЗЛП-4, которые решаются симплекс-методом без учета требований на целочисленность с последующим анализом решений. Если ни одна из задач ЗЛП-3 и ЗЛП-4 не имеет целочисленного решения, приступают к ветвлению задачи ЗЛП-2.

Процесс ветвления продолжается до тех пор, пока не будет получено в одной из ветвей целочисленное решение. Пусть задача ЗЛП-4 (рис. 2) имеет целочисленное решение. Обозначим $\underline{f}$ – значение функции на первом целочисленном решении: $\underline{f} = f\left(x^{4*}\right)$. Соответствующее целочисленное решение включается в множество X^* возможных оптимальных решений исходной задачи. После того как найдено первое целочисленное решение, вопрос о дальнейшем ветвлении других задач решается на основании сравнения значений $f(x^{k*})$ на оптимальных нецелочисленных решениях в оставшихся ветвях со значением $\underline{f}$.

Если $f\left(x^{k*}\right) \le \underline{f}$ для всех оставшихся k, то расчет закончен. Решениями исходной задачи являются те целочисленные решения x^{k*}, для которых $f(x^{k*}) = \underline{f}$. Если

$f\left(x^{k*}\right) > \underline{f}$, то соответствующая этому номеру k задача ветвится далее. Так, на рис. 2 имеем $f\left(x^{2*}\right) > \underline{f}$ и $f\left(x^{3*}\right) < \underline{f}$. Задача ЗЛП-2 подлежит ветвлению на ЗЛП-5 и ЗЛП-6, а ЗЛП-3 не подлежит ветвлению. Задача ЗЛП-6 не имеет решения, так как множество допустимых решений пустое, и поэтому далее она не рассматривается. Задача ЗЛП-5 имеет нецелочисленное решение $x^{5*}, f(x^{5*})$. Если $f\left(x^{5*}\right) < \underline{f}$, то решение задачи закончено и $x^* = x^{4*}$, $f(x^*) = \underline{f}$. В противном случае задача ЗЛП-5 ветвится дальше.

Если в одной из задач получено целочисленное решение, то ее ветвление далее не производится. Если соответствующее значение целевой функции не меньше $\underline{f}$, решение считается принадлежащим множеству X^* возможных оптимальных решений исходной задачи. Если значение целевой функции меньше $\underline{f}$, целочисленное решение не включается в множество X^*.

Таким образом, ветвление какой-либо задачи заканчивается, если выполняется одно из условий, а именно: решение целочисленное; значение целевой функции данной задачи не больше $\underline{f}$; множество допустимых решений пустое.

Если ветвление всех задач закончено, то в множестве X^* выбирается решение (решения), которому соответствует наибольшее значение целевой функции. Оно и является решением исходной задачи. Если множество X^* пустое, то исходная задача не имеет решения.

Алгоритм определяет правила ветвления задач и правила окончания ветвления (нахождения границ), что соответствует его названию.

З а м е ч а н и е. Распространенным методом решения задач линейного целочисленного программирования, опирающимся на сведение исходной задачи к решению последовательности задач линейного программирования без учета требования целочисленности, является метод Гомори [1,2].

Лекция 8

8. ТРАНСПОРТНЫЕ ЗАДАЧИ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположим, что в пунктах $A_1, A_2, ..., A_m$ хранится однородный груз в количестве $a_1, a_2, ..., a_m$ единиц. Этот груз следует доставить в n заданных пунктов назначения $B_1, B_2, ..., B_n$, причем в каждый из них требуется завезти соответственно $b_1, b_2, ..., b_n$ единиц этого груза. Обозначим через c_{ij} стоимость перевозки единицы груза из пункта A_i в пункт B_j.

Транспортные задачи делятся на две группы.

1. Задачи, удовлетворяющие *условию баланса*

$$\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{j=1}^{n} b_j ,$$

означающему, что общий запас груза на всех пунктах хранения равен суммарной потребности всех пунктов назначения.

2. Задачи с нарушенным балансом, среди которых выделяются два случая:

а) $\sum\limits_{i=1}^{m} a_i > \sum\limits_{j=1}^{n} b_j$ (суммарные запасы больше суммарных потребностей);

б) $\sum\limits_{i=1}^{m} a_i < \sum\limits_{j=1}^{n} b_j$ (суммарные запасы меньше суммарных потребностей).

Рассмотрим формализацию транспортной задачи, удовлетворяющей условию баланса.

Обозначим x_{ij} – количество груза, перевозимого из пункта A_i в пункт B_j. Тогда *суммарная стоимость перевозок* имеет вид

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} c_{ij} \cdot x_{ij} .$$

Ограничения представляются *уравнениями вывоза и привоза* груза:

$$x_{i1} + x_{i2} + ... + x_{in} = a_i , \quad i = 1,2,...,m ;$$

$$x_{1j} + x_{2j} + ... + x_{mj} = b_j , \quad j = 1,2,...,n ;$$

$$x_{ij} \geq 0 , \quad i = 1,2,...,m ; \quad j = 1,2,...,n .$$

Первое уравнение означает, что из каждого пункта хранения A_i вывозится весь груз, а второе уравнение описывает факт удовлетворения всех потребностей в пункте B_j. Условие неотрицательности свидетельствует о том, что груз либо вывозится из пункта A_i в пункт B_j, и тогда $x_{ij} > 0$, либо нет, и в этом случае $x_{ij} = 0$.

Решение x_{ij}, $i = 1,2,...,m$; $j = 1,2,...,n$, системы называется *планом перевозок*.

Требуется найти такой план перевозок, чтобы их суммарная стоимость была минимальной, т.е.

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij} \cdot x_{ij} \to \min .$$

Условия задачи удобно записывать в виде *матрицы перевозок* (табл. 1).

Таблица 1

Пункты	B_1	B_2	...	B_j	...	B_n	Запасы
A_1	c_{11}	c_{12}		c_{1j}		c_{1n}	a_1
A_2	c_{21}	c_{22}		c_{2j}		c_{2n}	a_2
$\vdots$							$\vdots$
A_i	c_{i1}	c_{i2}		c_{ij}		c_{in}	a_i
$\vdots$							$\vdots$
A_m	c_{m1}	c_{m2}		c_{mj}		c_{mn}	a_m
Потребности	b_1	b_2	...	b_j	...	b_n	Сумма

Заметим, что с помощью линейных преобразований можно показать зависимость одного из уравнений в системе от остальных, т.е. в этой системе имеется $(m + n - 1)$ независимых уравнений. Лишнее уравнение может быть исключено из системы уравнений-ограничений.

В матрице перевозок хранится текущий план перевозок x_{ij}, $i = 1,2,...,m$; $j = 1,2,...,n$.

Стратегия решения задачи

Так как поставленная задача является частным случаем задачи линейного программирования, то стратегия решения аналогична:

1) находится начальный план перевозок;

2) производится улучшение начального плана, т.е. последовательный переход от одного плана к другому, связанный с уменьшением суммарной стоимости перевозок. Процесс перехода от одного плана к другому завершается, когда уменьшение суммарной стоимости перевозок станет невозможным.

МЕТОДЫ НАХОЖДЕНИЯ НАЧАЛЬНОГО ПЛАНА ПЕРЕВОЗОК

Клетки матрицы перевозок, где $x_{ij} > 0$, называются *базисными*, а остальные, где $x_{ij} = 0$, – *свободными*. В матрице имеется $(m + n - 1)$ базисных клеток. Их число совпадает с числом независимых уравнений-ограничений.

Значение x_{ij} в матрице перевозок находится по формуле

$$x_{ij} = \min \begin{cases} \text{остаток груза в пункте } A_i, \\ \text{неудовлетворенные потребности в пункте } B_j. \end{cases} \quad (*)$$

Значение $x_{ij} = 0$ в свободной клетке не пишется явно, а вместо этого в ней ставится точка.

А. Метод северо-западного угла

Вычисления осуществляются по формуле (*), начиная с элемента x_{11}, стоящего в северо-западном углу матрицы перевозок.

Пример 1. Найти начальный план перевозок в транспортной задаче, заданной матрицей перевозок (табл. 2).

Таблица 2

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	2 10	3 10	4 •	20
A_2	1 •	2 10	5 30	40
Потребности	10	20	30	60

☐ Начнем с северо-западного угла, т.е. $x_{11} = \min [20, 10] = 10$. Тогда в пункте B_1 потребности удовлетворены и, следовательно, $x_{21} = 0$ (в табл. 2 ставится точка). Первый столбец выбывает из рассмотрения.

Продолжим с северо-западного угла, т.е. $x_{12} = \min [(20 - 10), 20] = \min[10, 20] = 10$. Тогда запасы в пункте A_1 исчерпаны и $x_{13} = 0$ (в табл. 2 ставится точка). При этом первая строка выбывает из рассмотрения.

Продолжим с северо-западного угла:

$$x_{22} = \min [40, (20 - 10)] = \min [40, 10] = 10.$$

Потребности в пункте B_2 удовлетворены, и второй столбец выбывает из рассмотрения.

Заполним последний элемент, находящийся в северо-западном углу:
$x_{23} = \min [(40 - 10), 30] = 30$. Таким образом, получен начальный план перевозок:

$$x_{11} = 10, \quad x_{12} = 10, \quad x_{13} = 0,$$

$$x_{21} = 0, \quad x_{22} = 10, \quad x_{23} = 30$$

с суммарной стоимостью $f = 2 \cdot 10 + 3 \cdot 10 + 4 \cdot 0 + 1 \cdot 0 + 2 \cdot 10 + 5 \cdot 30 = 220$. Число базисных клеток, очевидно, составит $m + n - 1 = 2 + 3 - 1 = 4$.■

З а м е ч а н и е. При нахождении начального плана перевозок возможен случай вырождения, когда в результате вычислений значения x_{ij} получается, что потребности в пункте B_j удовлетворены, а запасы в пункте A_i исчерпаны. Тогда одновременно из рассмотрения выбывают строка и столбец. В этом случае рекомендуется поставить в одну из клеток выбывающих строки и столбца (лучше в клетку с наименьшей стоимостью) так называемый *базисный нуль*. Клетка с базисным нулем считается базисной (в ней пишется **0**), а общее число базисных клеток остается равным $(m+n-1)$.

Пример 2. Методом северо-западного угла найти начальный план перевозок в транспортной задаче, заданной матрицей перевозок (табл. 3).

Таблица 3

Пункты	B_1	B_2	B_3	B_4	Запасы
A_1	1 30	2 20	3 •	5 •	50
A_2	4 •	1 **0**	1 40	2 •	40
A_3	1 •	2 •	5 10	10 50	60
Потребности	30	20	50	50	150

□ Начнем заполнение таблицы с северо-западного угла:

$$x_{11} = \min[50, 30] = 30; \quad x_{21} = x_{31} = 0 \text{ (ставится точка).}$$

Далее снова продолжим с северо-западного угла:

$x_{12} = \min[(50-30), 20] = \min[20, 20] = 20$ (это случай вырождения, так как выбывают первая строка и второй столбец: $x_{13} = x_{14} = x_{22} = x_{32} = 0$.

Базисный нуль поставим в клетку (2,2) с наименьшей стоимостью, равной $\min[3; 5; 1; 2] = 1$. В остальных выбывающих клетках ставятся точки.

Продолжим с северо-западного угла:

$$x_{23} = \min[40, 50] = 40; \quad x_{24} = 0 \text{ (ставится точка).}$$

Из рассмотрения выбывает вторая строка.

Продолжим с северо-западного угла:

$$x_{33} = \min[60, (50-40)] = 10 \quad \text{и} \quad x_{34} = \min[(60-10), 50] = 50.$$

Таким образом, получен начальный план перевозок

$$x_{11} = 30, \quad x_{12} = 20, \quad x_{13} = x_{14} = 0,$$
$$x_{21} = x_{22} = 0, \quad x_{23} = 40, \quad x_{24} = 0,$$
$$x_{31} = x_{32} = 0, \quad x_{33} = 10, \quad x_{34} = 50$$

с суммарной стоимостью

$$f = 30 + 40 + 40 + 50 + 500 = 660.$$

Число базисных клеток с учетом базисного нуля, очевидно, составит $m+n-1 = 3+4-1 = 6$.■

Пример 3. Методом северо-западного угла найти начальный план перевозок в транспортной задаче, заданной матрицей перевозок (табл. 4).

Таблица 4

Пункты	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	Запасы
A_1	^{3} 40	^{4} •	^{5} •	^{1} **0**	^{1} •	40
A_2	^{2} •	^{5} 30	^{6} 10	^{1} 10	^{1} **0**	50
A_3	^{3} •	^{1} •	^{2} •	^{3} •	^{4} 50	50
A_4	^{2} •	^{3} •	^{5} •	^{6} •	^{10} 10	10
Потребности	40	30	10	10	60	150

☐ Решим аналогично примеру 2:

а) $x_{11} = \min[40, 40] = 40$ (случай вырождения);

$x_{12} = x_{13} = x_{14} = x_{15} = x_{21} = x_{31} = x_{41} = 0$ (базисный нуль ставится в клетку (1,4) с наименьшей стоимостью, а в остальные ставятся точки);

б) $x_{22} = \min[50, 30] = 30$, $x_{32} = x_{42} = 0$ (ставятся точки);

в) $x_{23} = \min[(50-30), 10] = 10$, $x_{33} = x_{43} = 0$ (ставятся точки);

г) $x_{24} = \min[(50-30-10), 10] = \min[10, 10] = 10$ (случай вырождения);

$x_{25} = 0$ (ставится базисный нуль, так как это клетка с наименьшей стоимостью среди выбывающих клеток), $x_{34} = x_{44} = 0$ (ставятся точки);

д) $x_{35} = \min[50, 60] = 50$;

е) $x_{45} = \min[10, (60-50)] = 10$.

Таким образом, начальный план перевозок содержит два базисных нуля, следовательно, число базисных клеток составит $m + n - 1 = 4 + 5 - 1 = 8$.■

Б. Метод минимального элемента

Получаемый методом северо-западного угла начальный план перевозок не зависит от их стоимости и поэтому в общем случае далек от наилучшего. В методе минимального элемента учитываются затраты на перевозку, следовательно, соответствующий начальный план, как правило, позволяет обеспечить меньшую суммарную стоимость, более близкую к оптимальной.

В этом методе по формуле (*) последовательно заполняются клетки с наименьшей стоимостью перевозок. Если имеется несколько клеток с наименьшей стоимостью, то из них выбирается любая.

Пример 4. Найти начальный план перевозок в транспортной задаче, заданной матрицей перевозок (табл. 5).

Таблица 5

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	^{2} •	^{3} •	^{4} 20	20
A_2	^{1} 10	^{2} 20	^{5} 10	40
Потребности	10	20	30	60

□ Заполним клетку с наименьшей стоимостью, равной 1:

$$x_{21} = \min [40, 10] = 10.$$

Тогда потребности в пункте B_1 удовлетворены и $x_{11} = 0$ (в табл. 5 ставится точка), первый столбец выбывает из рассмотрения.

Из оставшихся клеток найдем клетку с наименьшей стоимостью и заполним ее: $x_{22} = \min [(40-10), 20] = 20$. Тогда $x_{12} = 0$ (в табл. 5 ставится точка), потребности в пункте B_2 удовлетворены и выбывает второй столбец.

Из оставшихся двух клеток заполним клетку с наименьшей стоимостью: $x_{13} = \min [20, 30] = 20$. Тогда первая строка выбывает (запасы в пункте A_1 исчерпаны) и $x_{23} = \min [(40-30), (30-20)] = 10$.

Таким образом, получен начальный план перевозок

$$x_{11} = 0, \quad x_{12} = 0, \quad x_{13} = 20,$$

$$x_{21} = 10, \quad x_{22} = 20, \quad x_{23} = 10$$

с суммарной стоимостью

$$f = 2 \cdot 0 + 3 \cdot 0 + 4 \cdot 20 + 1 \cdot 10 + 2 \cdot 20 + 5 \cdot 10 = 180.$$

Заметим, что она меньше полученной с помощью метода северо-западного угла (см. пример 1). Число базисных клеток, очевидно, составляет $m + n - 1 = 2 + 3 - 1 = 4$. ■

МЕТОД ПОТЕНЦИАЛОВ

Метод обеспечивает улучшение начального плана перевозок. При этом происходит переход от одного плана перевозок к другому (от одной матрицы перевозок к другой) до тех пор, пока уменьшение суммарной стоимости перевозок станет невозможным.

Введем следующие понятия.

1. *Цикл* – замкнутая ломаная с вершинами в клетках и звеньями, расположенными вдоль строк и столбцов матрицы перевозок. В каждой вершине встречаются два звена, причем одно из них располагается по строке, а другое – по столбцу. Число вершин цикла четно. Циклом может быть самопересекающаяся ломаная, но точки ее самопересечения не могут быть вершинами цикла.

2. *Означенный цикл* – цикл, в котором некоторой вершине приписан знак «+», а затем при обходе цикла в каком-либо направлении знаки чередуются.

3. *Сдвиг по циклу* на число $\theta \geq 0$. При этом значения x_{ij}, стоящие в положительных вершинах цикла, увеличиваются на число θ, а стоящие в отрицательных вершинах, уменьшаются на число θ.

4. *Потенциалы* – числа $\alpha_i, i = 1,2,\ldots,m;$ $\beta_j, j = 1,2,\ldots,n$. Каждому пункту хранения A_i ставится в соответствие число α_i, пункту потребления B_j – число β_j.

Алгоритм

Шаг 1. Найти начальный план перевозок методом северо-западного угла или методом минимального элемента.

Шаг 2. Для каждой базисной клетки составить уравнение

$$\alpha_i + \beta_j = c_{ij}.$$

Так как эти уравнения образуют систему $(m+n-1)$ уравнений с $(m+n)$ неизвестными (она имеет бесконечное множество решений), то для определенности следует положить $\alpha_1 = 0$. Тогда все остальные потенциалы находятся однозначно.

Шаг 3. Для каждой свободной клетки вычислить относительные оценки:

$$\Delta_{ij} = c_{ij} - (\alpha_i + \beta_j).$$

Шаг 4. Проанализировать относительные оценки:

а) если все относительные оценки неотрицательные, т.е. выполняется условие

$$\Delta_{ij} \geq 0,$$

то задача решена, и следует выписать полученный оптимальный план перевозок из последней матрицы, подсчитать его стоимость;

б) если среди оценок Δ_{ij} есть отрицательные, найти среди них наименьшую отрицательную оценку и пометить знаком $\otimes$.

Шаг 5. Для свободной клетки (i, j) с выбранной оценкой Δ_{ij}, помеченной $\otimes$, построить означенный цикл. Все его вершины, кроме расположенной в клетке (i, j), должны находиться в базисных клетках. Свободная клетка берется со знаком «+».

Шаг 6. Выполнить сдвиг по построенному на шаге 5 циклу на величину θ, равную наименьшему из чисел, стоящих в отрицательных вершинах. При этом числа, стоящие в положительных вершинах, увеличить на θ, а числа, стоящие в отрицательных вершинах, уменьшить на θ.

Если наименьшее значение θ достигается в нескольких отрицательных вершинах цикла, то при сдвиге следует поставить базисный нуль во всех таких вершинах, кроме одной. Тогда число базисных клеток сохранится и будет равно $(m+n-1)$, что необходимо проверять при расчетах. Базисный нуль рекомендуется ставить в клетку (клетки) с наименьшей стоимостью перевозок.

Элементы матрицы, не входящие в цикл, остаются без изменений.

Перейти к шагу 2.

З а м е ч а н и я.

1. При решении задач может возникнуть ситуация, когда $\theta = 0$. Тогда при сдвиге свободная клетка становится базисной (точка заменяется на базисный нуль).

2. Значения суммарной стоимости перевозок при переходе от одной матрицы к другой связаны соотношением

$$f^{k+1} = f^k + \theta \cdot \Delta_{ij},$$

где k – номер итерации, f^k – текущее значение суммарной стоимости перевозок, значения θ и Δ_{ij} находятся на шагах 3 и 6 соответственно.

Пример 5. Решить транспортную задачу (табл. 6).

Таблица 6

Пункты	B_1	B_2	Запасы	
A_1	1 $\ominus$ 30	2 10 $\oplus$	40	$\alpha_1 = 0$
A_2	3 $\bullet$	2 30	30	$\alpha_2 = 0$
A_3	1 $\oplus$ $\bullet$	4 30 $\ominus$	30	$\alpha_3 = 2$
Потребности	30	70	100	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$		

☐ Решим задачу согласно алгоритму.

1. Найдем начальный план перевозок методом северо-западного угла:

$$x_{11} = \min[40, 30] = 30; \ \ x_{21} = x_{31} = 0 \text{ (в табл. 6 ставятся точки)};$$

$$x_{12} = \min[(40-30), 70] = 10,$$

$$x_{22} = \min[30, (70-10)] = 30,$$

$$x_{32} = \min[30, (70-10-30)] = 30.$$

Его стоимость $f = 30 + 20 + 60 + 120 = 230$.

2^1. Найдем потенциалы, составляя для каждой базисной клетки уравнение $\alpha_i + \beta_j = c_{ij}$.

Положим $\alpha_1 = 0$. Тогда для базисных клеток (1,1) и (1,2) получим

$$\alpha_1 + \beta_1 = 1,$$

$$\alpha_1 + \beta_2 = 2.$$

Отсюда $\beta_1 = 1, \ \beta_2 = 2$.

Далее для базисных клеток (2,2) и (3,2) имеем

$$\alpha_2 + \beta_2 = 2,$$

$$\alpha_3 + \beta_2 = 4.$$

Отсюда $\alpha_2 = 0, \ \alpha_3 = 2$.

3^1. Для каждой свободной клетки вычислим относительные оценки:

$$\Delta_{21} = c_{21} - (\alpha_2 + \beta_1) = 3 - (0+1) = 2 > 0,$$

$$\Delta_{31} = c_{31} - (\alpha_3 + \beta_1) = 1 - (2+1) = -2 < 0. \ \otimes$$

4^1. Проанализируем относительные оценки. Так как условие окончания $\Delta_{ij} \geq 0$ не выполнено, то найдем наименьшую отрицательную оценку: Δ_{31}.

5^1. Для клетки (3,1) построим означенный цикл. Все его вершины, кроме данной, находятся в базисных клетках. Знак «+» ставится в свободной клетке (3,1).

6^1. Найдем число $\theta = \min[30, 30] = 30$, равное наименьшему из чисел, стоящих в отрицательных вершинах цикла. Выполним сдвиг по циклу на число $\theta = 30$: числа, стоящие в положительных вершинах, увеличиваются на 30, а числа, стоящие в отрицательных вершинах, уменьшаются на 30. Так как наименьшее значение $\theta = 30$ достигается в двух отрицательных вершинах, то в клетку (3,2) ставится точка, а в клетку (1,1) с наименьшей стоимостью – базисный нуль. Элементы матрицы, не входящие в цикл, остаются без изменений. Результат сдвига представлен в табл. 7. Перейдем к шагу 2.

Таблица 7

Пункты	B_1	B_2	Запасы	
A_1	^{1} **0**	^{2} 40	40	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{3} •	^{2} 30	30	$\alpha_2 = 0$
A_3	^{1} 30	^{4} •	30	$\alpha_3 = 0$
Потребности	30	70	100	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$		

2^2. Найдем потенциалы. Для базисных клеток (1,1) и (1,2) получим

$$\alpha_1 + \beta_1 = 1,$$

$$\alpha_1 + \beta_2 = 2.$$

Поскольку $\alpha_1 = 0$, то $\beta_1 = 1, \beta_2 = 2$.

Для базисной клетки (2,2) имеем $\alpha_2 + \beta_2 = 2$, откуда $\alpha_2 = 0$. Для базисной клетки (3, 1) получим $\alpha_3 + \beta_1 = 1$, отсюда $\alpha_3 = 0$.

3^2. Для каждой свободной клетки вычислим относительные оценки:

$$\Delta_{21} = c_{21} - (\alpha_2 + \beta_1) = 3 - (0 + 1) = 2 > 0,$$

$$\Delta_{32} = c_{32} - (\alpha_3 + \beta_2) = 4 - (0 + 2) = 2 > 0.$$

4^2. Поскольку условие окончания $\Delta_{ij} \geq 0$ выполнено, задача решена. Оптимальный план перевозок

$$x_{11} = 0, \quad x_{12} = 40,$$

$$x_{21} = 0, \quad x_{22} = 30,$$

$$x_{31} = 30, \quad x_{32} = 0$$

имеет суммарную стоимость $f = 80 + 60 + 30 = 170$. Согласно п.2 замечаний это же значение может быть найдено по формуле $f^1 = f^0 + \theta \cdot \Delta_{31} = 230 + 30 \cdot (-2) = 170$. ■

З а м е ч а н и я.

1. Задачи с нарушенным балансом решаются путем сведения к задачам, удовлетворяющим условию баланса. Далее применяется метод потенциалов. Оптимальный план перевозок новой задачи содержит оптимальный план перевозок исходной задачи.

Здесь могут быть два случая.

Первый случай. Суммарные запасы больше суммарных потребностей, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m} a_i > \sum_{j=1}^{n} b_j .$$

В этом случае следует:

1) ввести фиктивный пункт потребления B_{n+1} с потребностью

$$b_{n+1} = \sum_{i=1}^{m} a_i - \sum_{j=1}^{n} b_j ;$$

2) положить стоимости перевозок единицы груза в фиктивный пункт потребления равными нулю: $c_{i,n+1} = 0,\ \ i = 1,2,...,m$.

Второй случай. Суммарные запасы меньше суммарных потребностей, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m} a_i < \sum_{j=1}^{n} b_j .$$

В данном случае следует:

1) ввести фиктивный пункт хранения A_{m+1} с запасом груза, равным

$$a_{m+1} = \sum_{j=1}^{n} b_j - \sum_{i=1}^{m} a_i ;$$

2) положить стоимости перевозок единицы груза из фиктивного пункта хранения равными нулю: $c_{m+1,j} = 0,\ \ j = 1,2,...,n$.

2. В задачах с нарушенным балансом может встречаться дополнительное требование к оптимальному плану перевозок. В первом случае: полностью вывезти продукцию из заданного пункта хранения, а во втором – полностью удовлетворить потребности заданного пункта потребления. В обоих случаях действия при решении аналогичны описанным в п.1, только стоимости перевозок единицы груза для заданных пунктов следует положить равными M, где M – достаточно большое положительное число. Однако следует заметить, что такие задачи могут не иметь решения, например, в следующих случаях:

- суммарные запасы больше суммарных потребностей, требуется полностью вывезти груз из заданного пункта хранения, но запасы в нем превышают суммарные потребности;
- суммарные запасы меньше суммарных потребностей, требуется полностью обеспечить потребности данного пункта потребления, но потребности в нем превышают суммарные запасы.

Лекция 9

Раздел II. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

1. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается проблема решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), записываемых в виде

$$Ax = b \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

где $A = (a_{ij}) \in R^{n \times n}$ – действительная матрица размеров $(n \times n)$, i, j – переменные, соответствующие номерам строк и столбцов (целые числа); $b = (b_1, ..., b_n)^T \in R^n$ – вектор-столбец размеров $(n \times 1)$, $x = (x_1, ..., x_n)^T \in R^n$ – вектор-столбец неизвестных, R^n – n-мерное евклидово пространство, верхний индекс "T" здесь и далее обозначает операцию транспонирования.

Требуется найти решение $x_* = (x_{*1}, ..., x_{*n})^T \in R^n$ системы, подстановка которого в систему приводит к верному равенству $A x_* = b$.

Замечания.

1. Из курса линейной алгебры известно, что решение задачи существует и единственно, если определитель (детерминант) матрицы A отличен от нуля, т.е. $\det A \equiv |A| \neq 0$ (A – невырожденная матрица, называемая также неособенной).

Классификация численных методов решения СЛАУ

При решении СЛАУ используются два класса численных методов:

1. *Прямые методы*, позволяющие найти решение за определенное число операций. К прямым методам относятся: метод Гаусса и его модификации (в том числе метод прогонки), метод LU – разложения и др. Изучаются в курсе линейной алгебры.

2. *Итерационные методы,* основанные на использовании повторяющегося (циклического) процесса и позволяющие получить решение в результате последовательных приближений. Операции, входящие в повторяющийся процесс, составляют *итерацию*. К итерационным методам относятся: метод простых итераций, метод Зейделя и др.

ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

А. МЕТОД ПРОСТЫХ ИТЕРАЦИЙ

Альтернативой прямым методам являются итерационные методы, основанные на многократном уточнении $x^{(0)}$ – приближенно заданного решения задачи $A x = b$. Верхним индексом в скобках здесь и далее по тексту обозначается номер итерации (совокупности повторяющихся действий).

Методика решения задачи

Шаг 1. Исходная задача $A\,x = b$ преобразуется к равносильному виду:

$$x = \alpha\,x + \beta,$$

где $\alpha = \{\alpha_{ij}\}$ – квадратная матрица, $\beta = \{\beta_i\}$ – вектор, $i, j = 1,\ldots,n$. Это преобразование может быть выполнено различными путями, но для обеспечения сходимости итераций (см. процедуру 2) нужно добиться, чтобы $\|\alpha\| < 1$ (чтобы норма α была меньше единицы. Понятие нормы вводится ниже.)

Шаг 2. Вектор β принимается в качестве начального приближения $x^{(0)} = \beta$ и далее многократно выполняются действия по уточнению решения согласно рекуррентному соотношению

$$x^{(k+1)} = \alpha\,x^{(k)} + \beta, \qquad k = 0,1,\ldots$$

или в развернутом виде

$$\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \alpha_{11}x_1^{(k)} + \alpha_{12}x_2^{(k)} + \ldots + \alpha_{1n}x_n^{(k)} + \beta_1\,,\\
x_2^{(k+1)} &= \alpha_{21}x_1^{(k)} + \alpha_{22}x_2^{(k)} + \ldots + \alpha_{2n}x_n^{(k)} + \beta_2\,,\\
&\vdots\\
x_n^{(k+1)} &= \alpha_{n1}x_1^{(k)} + \alpha_{n2}x_2^{(k)} + \ldots + \alpha_{nn}x_n^{(k)} + \beta_n\,.
\end{aligned}$$

Шаг 3. Итерации прерываются при выполнении условия

$$\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon\,,$$

где $\varepsilon > 0$ – заданная точность, которую необходимо достигнуть при решении задачи.

Замечания.

1. Процесс называется *параллельным итерированием*, так как для вычисления $(k+1)$-го приближения всех неизвестных учитываются вычисленные ранее их k-е приближения.

2. Начальное приближение $x^{(0)}$ может выбираться произвольно, или из некоторых соображений, например $x^{(0)} = \beta$. При этом может использоваться априорная информация о решении или просто «грубая» прикидка.

Нормы матриц и векторов

Наиболее употребительными являются следующие формулы для вычисления значений норм матриц и векторов, образованных действительными компонентами.

Нормы матрицы A	***Нормы вектора*** x
1) $\\| A \\|_1 = \max\limits_i \sum\limits_{j=1}^{n} \left\| a_{ij} \right\|$;	$\\| x \\|_1 = \max\limits_i \left\| x_i \right\|$;
2) $\\| A \\|_2 = \max\limits_j \sum\limits_{i=1}^{n} \left\| a_{ij} \right\|$;	$\\| x \\|_2 = \sum\limits_{i=1}^{n} \left\| x_i \right\|$;
3) $\\| A \\|_3 = \sqrt{\sum\limits_{i=1}^{n} \sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}^2}$;	$\\| x \\|_3 = \sqrt{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2}$.

Скорость сходимости

Рассмотрим последовательность $\left\{x^{(k)}\right\}$, сходящуюся к x_*. Предположим, что все ее элементы различны и ни один из них не совпадает с x_*. Наиболее эффективный способ оценивания скорости сходимости состоит в сопоставлении расстояния между $x^{(k+1)}$ и x_* с расстоянием между $x^{(k)}$ и x_*.

Последовательность $\left\{x^{(k)}\right\}$ называется *сходящейся с порядком* p, если p – максимальное число, для которого

$$0 \le \lim_{k \to \infty} \frac{\left\| x^{(k+1)} - x_* \right\|}{\left\| x^{(k)} - x_* \right\|^p} < \infty .$$

Поскольку величина p определяется предельными свойствами $\left\{x^{(k)}\right\}$, она называется *асимптотической скоростью сходимости*.

Если последовательность $\left\{x^{(k)}\right\}$ – сходящаяся с порядком p, то число

$$c = \lim_{k \to \infty} \frac{\left\| x^{(k+1)} - x_* \right\|}{\left\| x^{(k)} - x_* \right\|^p}$$

называется *асимптотическим параметром ошибки*.

Если $p = 1$, $c < 1$, то сходимость *линейная*, если $p = 2$ – *квадратичная*, если $p = 3$ – *кубичная* и т.д. Если $p > 1$ или $p = 1, c = 0$, то сходимость *сверхлинейная*. Линейная сходимость является синонимом сходимости со скоростью геометрической прогрессии. Сверхлинейная сходимость является более быстрой, чем определяемая любой геометрической прогрессией.

Теоремы о сходимости

Теорема (о достаточном условии сходимости метода простых итераций). *Метод простых итераций, реализующийся в процессе последовательных приближений, сходится к единственному решению исходной системы* $Ax = b$ *при любом начальном приближении* $x^{(0)}$ *со скоростью не медленнее геометрической прогрессии, если какая-либо норма матрицы* α *меньше единицы, т.е.* $\| \alpha \|_s < 1$ ($s \in \{1,2,3\}$).

З а м е ч а н и я.

1. Сходящийся процесс обладает свойством *самоисправляемости*, т.е. отдельная ошибка в промежуточных вычислениях не отразится на окончательном результате, так как ошибочное приближение можно рассматривать как новое начальное.

2. Условия сходимости выполняются, если в матрице A диагональные элементы преобладают, т.е.

$$|a_{ii}| \ge |a_{i1}| + \ldots + |a_{i,i-1}| + |a_{i,i+1}| + \ldots + |a_{in}|, \quad i = 1,\ldots,n,$$

и хотя бы для одного i неравенство строгое. Иначе, модули диагональных коэффициентов в каждом уравнении системы больше суммы модулей недиагональных коэффициентов (свободные члены не рассматриваются).

3. Чем меньше величина нормы $\| \alpha \|$, тем быстрее сходимость метода.

Способы преобразования системы

Преобразование системы $Ax = b$ к виду $x = \alpha x + \beta$ с матрицей α, удовлетворяющей условиям сходимости, может быть выполнено несколькими способами. Приведем способы, используемые наиболее часто.

1. Уравнения, входящие в систему $Ax = b$, переставляются так, чтобы выполнялось условие преобладания диагональных элементов (для той же цели можно использовать другие элементарные преобразования). Затем первое уравнение разрешается относительно x_1, второе – относительно x_2 и т.д. При этом получается матрица α с нулевыми диагональными элементами.

Например, система

$$\begin{aligned} -2{,}8x_1 + x_2 + 4x_3 &= 60, \\ 10x_1 - x_2 + 8x_3 &= 10, \\ -x_1 + 2x_2 - 0{,}6x_3 &= 20 \end{aligned}$$

с помощью перестановки уравнений приводится к виду

$$\begin{aligned} 10x_1 - x_2 + 8x_3 &= 10, \\ -x_1 + 2x_2 - 0{,}6x_3 &= 20, \\ -2{,}8x_1 + x_2 + 4x_3 &= 60, \end{aligned}$$

где $|10| > |-1| + |8|$, $|2| > |-1| + |-0{,}6|$, $|4| > |-2{,}8| + |1|$, т.е. диагональные элементы преобладают.

Выражая x_1 из первого уравнения, x_2 – из второго, а x_3 – из третьего, получаем систему

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 0 \cdot x_1 + 0{,}1x_2 - 0{,}8x_3 + 1, \\
x_2 &= 0{,}5x_1 + 0 \cdot x_2 + 0{,}3x_3 + 10, \\
x_3 &= 0{,}7x_1 - 0{,}25x_2 + 0 \cdot x_3 + 15,
\end{aligned}
$$

где $\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0{,}1 & -0{,}8 \\ 0{,}5 & 0 & 0{,}3 \\ 0{,}7 & -0{,}25 & 0 \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 1 \\ 10 \\ 15 \end{pmatrix}$.

Заметим, что $\|\alpha\|_1 = \max\{0{,}9; 0{,}8; 0{,}95\} = 0{,}95 < 1$, т.е. условие теоремы выполнено.

Проиллюстрируем применение других элементарных преобразований. Так, система

$$
\begin{aligned}
4x_1 + x_2 + 9x_3 &= -7, \\
3x_1 + 8x_2 - 7x_3 &= -6, \\
x_1 + x_2 - 8x_3 &= 7
\end{aligned}
$$

путем сложения первого и третьего уравнений и вычитания из второго уравнения третьего уравнения преобразуется к виду

$$
\begin{aligned}
5x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0, \\
2x_1 + 7x_2 + x_3 &= -13, \\
x_1 + x_2 - 8x_3 &= 7
\end{aligned}
$$

с преобладанием диагональных элементов.

2. Уравнения преобразуются так, чтобы выполнялось условие преобладания диагональных элементов, но при этом коэффициенты α_{ii} не обязательно равнялись нулю.

Например, систему

$$
\begin{aligned}
1{,}02\,x_1 - 0{,}15\,x_2 &= 2{,}7, \\
0{,}8\,x_1 + 1{,}05\,x_2 &= 4
\end{aligned}
$$

можно записать в форме

$$
\begin{aligned}
x_1 &= -0{,}02\,x_1 + 0{,}15\,x_2 + 2{,}7, \\
x_2 &= -0{,}8\,x_1 - 0{,}05\,x_2 + 4,
\end{aligned}
$$

для которой $\|\alpha\|_1 = \max\{0{,}17; 0{,}85\} = 0{,}85 < 1$.

3. Если $\det A \neq 0$, систему $Ax = b$ следует умножить на матрицу $D = A^{-1} - \varepsilon$, где $\{\varepsilon_{ij}\}$ – матрица с малыми по модулю элементами. Тогда получается система

$(A^{-1} - \varepsilon)Ax = D\,b$ или $A^{-1}A\,x - \varepsilon A\,x = D\,b$, которую можно записать в форме $x = \alpha x + \beta$, где $\alpha = \varepsilon\,A$, $\beta = D\,b$. Если $\left|\varepsilon_{ij}\right|$, $i, j = 1,\ldots,n$, достаточно малы, условие сходимости выполняется.

Б. МЕТОД ЗЕЙДЕЛЯ

Этот метод является модификацией метода простых итераций и в некоторых случаях приводит к более быстрой сходимости.

Итерации по методу Зейделя отличаются от простых итераций тем, что при нахождении i-й компоненты $(k+1)$-го приближения сразу используются уже найденные компоненты $(k+1)$-го приближения с меньшими номерами $1,2,\ldots,i-1$. При рассмотрении развернутой формы системы итерационный процесс записывается в виде

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \alpha_{11}x_1^{(k)} + \alpha_{12}x_2^{(k)} + \alpha_{13}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{1n}x_n^{(k)} + \beta_1,\\
x_2^{(k+1)} &= \alpha_{21}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{22}x_2^{(k)} + \alpha_{23}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{2n}x_n^{(k)} + \beta_2,\\
x_3^{(k+1)} &= \alpha_{31}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{32}\boxed{x_2^{(k+1)}} + \alpha_{33}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{3n}x_n^{(k)} + \beta_3,\\
&\vdots\\
x_n^{(k+1)} &= \alpha_{n1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{n2}\boxed{x_2^{(k+1)}} + \alpha_{n3}\boxed{x_3^{(k+1)}} + \ldots + \alpha_{nn-1}\boxed{x_{n-1}^{(k+1)}} + \alpha_{nn}x_n^{(k)} + \beta_n.
\end{aligned}
\qquad (1.1)
$$

В каждое последующее уравнение подставляются значения неизвестных, полученных из предыдущих уравнений, что показано в записи стрелками.

Теорема о сходимости

Теорема (о достаточном условии сходимости метода Зейделя).

Если для системы $x = \alpha x + \beta$ какая-либо норма матрицы α меньше единицы, т.е. $\|\alpha\|_s < 1$ ($s \in \{1,2,3\}$), то процесс последовательных приближений сходится к единственному решению исходной системы $Ax = b$ при любом начальном приближении $x^{(0)}$.

Записывая (1.1) в матричной форме, получаем

$$x^{(k+1)} = Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} + \beta, \qquad (1.2)$$

где L, U являются разложениями матрицы α:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \cdots & \alpha_{1n} \\ 0 & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2n} \\ 0 & 0 & \alpha_{33} & \cdots & \alpha_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}.$$

Преобразуя (1.2) к виду $x = \alpha x + \beta$, получаем матричную форму итерационного процесса метода Зейделя:

$$x^{(k+1)} = \left(E - L\right)^{-1} U\, x^{(k)} + \left(E - L\right)^{-1} \beta. \qquad (1.3)$$

З а м е ч а н и я.

1. Для обеспечения сходимости метода Зейделя требуется преобразовать систему $Ax = b$ к виду $x = \alpha x + \beta$ с преобладанием диагональных элементов в матрице α (см. метод простых итераций).

Например, в системе

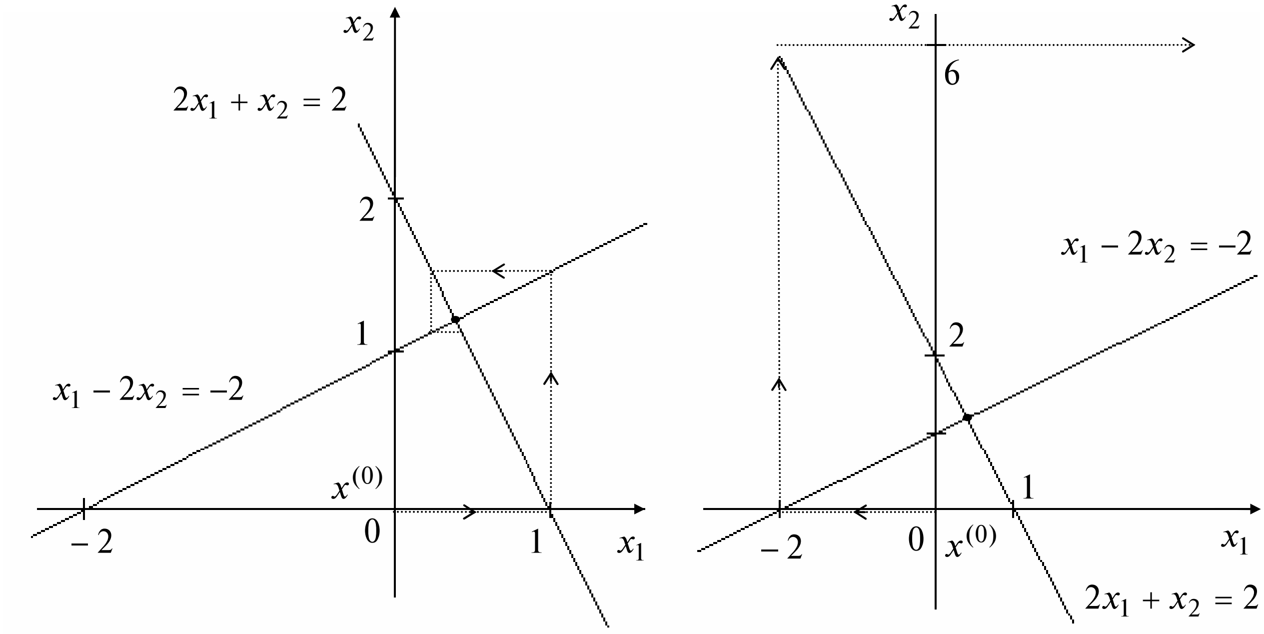
$$\begin{aligned} 2x_1 + x_2 &= 2, \\ x_1 - 2x_2 &= -2 \end{aligned}$$

диагональные элементы преобладают, так как $|2| > 1$, $|-2| > 1$.

Соотношения метода Зейделя (1.1) принимают вид

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= -\frac{x_2^{(k)}}{2} + 1, \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{x_1^{(k+1)}}{2} + 1. \end{aligned}$$

Выберем в качестве начального приближения $x^{(0)} = (0\,;0)^T$ (рис.1,*а*). Тогда $x_1^{(1)} = -\frac{x_2^{(0)}}{2} + 1 = 1$. Так как при этом $x_2^{(0)} = 0$, то вычислению $x_1^{(1)}$ соответствует движение по горизонтали до пересечения с прямой, описываемой первым уравнением. Далее $x_2^{(1)} = \frac{x_1^{(1)}}{2} + 1 = \frac{3}{2}$. Вычислению $x_2^{(1)}$ соответствует движение по вертикали до пересечения с прямой, описываемой вторым уравнением. Продолжая вычисления, получаем $x_1^{(2)} = -\frac{x_2^{(1)}}{2} + 1 = -\frac{3}{4} + 1 = \frac{1}{4}$, $x_2^{(2)} = \frac{x_1^{(2)}}{2} + 1 = \; = \frac{1}{8} + 1 = \frac{9}{8}$ и т.д. В результате имеем процесс, *сходящийся* к точке $x_* = \left(\frac{2}{5}; \frac{6}{5}\right)^T$.



а *б*

Рис. 1

Переставим уравнения в системе:

$$x_1 - 2x_2 = -2,$$
$$2x_1 + x_2 = 2.$$

В полученной системе диагональные элементы не преобладают. Уравнения метода Зейделя имеют вид

$$x_1^{(k+1)} = 2x_2^{(k)} - 2,$$
$$x_2^{(k+1)} = -2x_1^{(k+1)} + 2.$$

При $x^{(0)} = (0\,;0)^T$ получаем $x_1^{(1)} = -2$, $x_2^{(1)} = 6$ и т.д. В результате имеем *расходящийся процесс* (рис. 1,*б*).

2. Условие преобладания диагональных элементов является достаточным для сходимости, но не является необходимым.

3. Процесс (1.1) называется *последовательным итерированием*, так как на каждой итерации полученные из предыдущих уравнений значения подставляются в последующие. Как правило, метод Зейделя обеспечивает лучшую сходимость, чем метод простых итераций (за счет накопления информации). Метод Зейделя может сходиться, если расходится метод простых итераций, и наоборот.

4. При расчетах на компьютере удобнее пользоваться формулой (1.3).

5. Преимуществом метода Зейделя, как и метода простых итераций, является его *самоисправляемость*.

6. Метод Зейделя имеет преимущества перед методом простых итераций, так как он всегда сходится для *нормальных* систем линейных алгебраических уравнений, т.е. таких систем, в которых матрица A является симметрической и положительно определенной. Систему линейных алгебраических уравнений с невырожденной матрицей A всегда можно преобразовать к нормальной, если ее умножить слева на матрицу A^T. Таким образом, система $A^T Ax = A^T b$ является нормальной, а матрица $A^T A$ - симметрической.

Лекция 10

2. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРАХ МАТРИЦ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть A – действительная числовая квадратная матрица размеров $(n \times n)$. Ненулевой вектор $X = (x_1, ..., x_n)^T$ размеров $(n \times 1)$, удовлетворяющий условию

$$AX = \lambda X,$$

называется *собственным вектором* матрицы A. Число λ называется *собственным значением*. Говорят, что собственный вектор X соответствует (принадлежит) собственному значению λ.

Равенство равносильно однородной относительно X системе:

$$(A - \lambda E)X = 0, \quad (X \neq 0).$$

Система имеет ненулевое решение для вектора X (при известном λ) при условии $|A - \lambda E| = 0$. Это равенство есть *характеристическое уравнение*:

$$|A - \lambda E| = P_n(\lambda) = 0,$$

где $P_n(\lambda)$ – *характеристический многочлен* n*-й степени.* Корни $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ *характеристического уравнения* являются *собственными* (*характеристическими*) *значениями* матрицы A, а соответствующие каждому собственному значению λ_i, $i = 1, ..., n$, ненулевые векторы X^i, удовлетворяющие системе

$$AX^i = \lambda_i X^i \quad \text{или} \quad (A - \lambda_i E)X^i = 0, \; i = 1, 2, ..., n,$$

являются *собственными векторами*.

Требуется найти собственные значения и собственные векторы заданной матрицы.

Различают *полную* и *частичную проблему собственных значений*, когда необходимо найти весь спектр (все собственные значения) и собственные векторы либо часть спектра, например: $\rho(A) = \max_i |\lambda_i(A)|$ и $\min_i |\lambda_i(A)|$. Величина $\rho(A)$ называется *спектральным радиусом*.

Замечания.

1. Если для собственного значения λ_i найден собственный вектор X^i, то вектор μX^i, где μ – произвольное число, также является собственным вектором, соответствующим этому же собственному значению λ_i.

2. Симметрическая матрица имеет полный спектр λ_i, $i = \overline{1, n}$, действительных собственных значений; k-кратному корню характеристического уравнения симметрической матрицы соответствует ровно k линейно независимых собственных векторов.

А. МЕТОД ИТЕРАЦИЙ

Для решения частичной проблемы собственных значений и собственных векторов в практических расчетах часто используется метод итераций (*степенной метод*). На его основе можно определить приближенно собственные значения матрицы A и *спектральный радиус* $\rho(A) = \max |\lambda_i(A)|$.

Пусть матрица A имеет n линейно независимых собственных векторов $X^i, i = \overline{1,n}$, и собственные значения матрицы A таковы, что $\rho(A) = |\lambda_1(A)| > |\lambda_2(A)| \geq \ldots \geq |\lambda_n(A)|$.

Методика решения задачи

Шаг 1. Выбрать произвольное начальное (нулевое) приближение собственного вектора $X^{1(0)}$ (второй индекс в скобках здесь и ниже указывает номер приближения, а первый индекс без скобок соответствует номеру собственного значения). Положить $k = 0$.

Шаг 2. Найти $X^{1(1)} = AX^{1(0)}$, $\lambda_1^{(1)} = \dfrac{x_i^{1(1)}}{x_i^{1(0)}}$, где i – любой номер $1 \leq i \leq n$, и положить $k = 1$.

Шаг 3. Вычислить $X^{1(k+1)} = AX^{1(k)}$.

Шаг 4. Найти $\lambda_1^{(k+1)} = \dfrac{x_i^{1(k+1)}}{x_i^{1(k)}}$, где $x_i^{1(k+1)}, x_i^{1(k)}$ – соответствующие координаты векторов $X^{1(k+1)}$ и $X^{1(k)}$. При этом может быть использована любая координата с номером i, $i = \overline{1,n}$.

Шаг 5. Если $\Delta = \left|\lambda_1^{(k+1)} - \lambda_1^{(k)}\right| \leq \varepsilon$, процесс завершить и положить $\lambda_1 \cong \lambda_1^{(k+1)}$. Если $\Delta > \varepsilon$, положить $k = k + 1$ и перейти к п.3.

З а м е ч а н и я.

1. Процесс последовательных приближений

$$X^{1(1)} = AX^{1(0)},\ \ X^{1(2)} = AX^{1(1)} = A^2 X^{1(0)}, \ldots,$$

$$X^{1(k)} = AX^{1(k-1)} = A \cdot A^{k-1} X^{1(0)} = A^k X^{1(0)}, \ldots$$

сходится, т.е. при $k \to \infty$ вектор $X^{1(k)}$ стремится к собственному вектору X^1.

2. Используя λ_1, можно определить следующее значение λ_2 по формуле

$$\lambda_2 = \frac{x_i^{1(k+1)} - \lambda_1 x_i^{1(k)}}{x_i^{1(k)} - \lambda_1 x_i^{1(k-1)}} \quad (i = 1,2,\ldots,n).$$

Эта формула дает грубые значения для λ_2, так как значение λ_1 является приближенным. Если модули всех собственных значений различны, то на основе последней формулы можно вычислять и остальные $\lambda_j (j = 3,4,\ldots,n)$.

3. После проведения некоторого числа итераций рекомендуется «гасить» растущие компоненты получающегося собственного вектора. Это осуществляется нормировкой вектора, например, по формуле $\dfrac{X^{1(k)}}{\left\| X^{1(k)} \right\|_1}$.

Пример 1. Для матрицы $A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ найти спектральный радиус методом итераций с точностью $\varepsilon = 0{,}1$.

□ 1. Выбирается начальное приближение собственного вектора $X^{(0)} = (1;\,1;\,1)^T$. Положим $k = 0$.

2. Найдем

$$X^{1(1)} = A\,X^{1(0)} = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \\ 6 \end{pmatrix}; \qquad \lambda_1^{(1)} = \frac{x_1^{1(1)}}{x_1^{1(0)}} = \frac{8}{1} = 8,$$

положим $k = 1$.

3. Вычислим

$$X^{1(2)} = A\,X^{1(1)} = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 58 \\ 38 \\ 40 \end{pmatrix}.$$

4. Найдем

$$\lambda_1^{(2)} = \frac{x_1^{1(2)}}{x_1^{1(1)}} = \frac{58}{8} = 7{,}25.$$

5. Так как $\left|\lambda_1^{(2)} - \lambda_1^{(1)}\right| = 0{,}75 > \varepsilon$, то процесс необходимо продолжить. Результаты вычислений удобно представить в виде табл. 1.

Таблица 1

k	$x_1^{1(k)}$	$x_2^{1(k)}$	$x_3^{1(k)}$	$\lambda_1^{(k)}$	$\left\| \lambda_1^{(k)} - \lambda_1^{(k-1)} \right\|$
0	1	1	1	-	-
1	8	6	6	8	-
2	58	38	40	7,25	0,75
3	408	250	274	7,034	0,116
4	2838	1682	1888	6,9559	0,078 < ε

Точность по $\lambda_1^{(k)}$ достигнута на четвертой итерации. Таким образом, в качестве приближенного значения λ_1 берется $6{,}9559$, а в качестве собственного вектора принимается $X^1 = (2838, \quad 1682, \quad 1888)^T$. Так как собственный вектор определяется с точностью до постоянного множителя, то X^1 лучше пронормировать, т.е. поделить все его компоненты на величину нормы, например $\| X \|_1 = \max\limits_i \left| X_i^1 \right|$. Для рассматриваемого примера получим $X^1 = \dfrac{1}{2838}\begin{pmatrix} 2838 \\ 1682 \\ 1888 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1{,}000 \\ 0{,}5927 \\ 0{,}6652 \end{pmatrix}$.

В качестве собственного значения λ_1 можно взять не только отношение $\dfrac{x_1^{1(4)}}{x_1^{1(3)}} = \dfrac{2838}{408} = 6{,}9559$, но и $\dfrac{x_2^{1(4)}}{x_2^{1(3)}} = \dfrac{1682}{250} = 6{,}7280$; $\dfrac{x_3^{1(4)}}{x_3^{1(3)}} = \dfrac{1888}{274} = 6{,}8905$, а также их среднее арифметическое $\dfrac{6{,}9559 + 6{,}728 + 6{,}8905}{3} = 6{,}8581$. ■

Б. МЕТОД ВРАЩЕНИЙ

Метод используется для решения полной проблемы собственных значений симметрической матрицы и основан на преобразовании подобия исходной матрицы $A \in R^{n \times n}$ с помощью ортогональной матрицы H.

Две матрицы A и $A^{(i)}$ называются *подобными* ($A \sim A^{(i)}$ или $A^{(i)} \sim A$), если $A^{(i)} = H^{-1}AH$ или $A = HA^{(i)}H^{-1}$, где H – невырожденная матрица.

В методе вращений в качестве H берется *ортогональная матрица*, такая, что $HH^T = H^T H = E$, т.е. $H^T = H^{-1}$. В силу свойства ортогонального преобразования евклидова норма исходной матрицы A не меняется. Для преобразованной матрицы $A^{(i)}$ сохраняется ее след и собственные значения λ_i:

$$\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i(A) = \operatorname{tr} A^{(i)} .$$

При реализации метода вращений преобразование подобия применяется к исходной матрице A многократно:

$$A^{(k+1)} = \left(H^{(k)}\right)^{-1} A^{(k)} H^{(k)} = \left(H^{(k)}\right)^{T} A^{(k)} H^{(k)}, \qquad k = 0,1,\dots .$$

Формула определяет итерационный процесс, где начальное приближение $A^{(0)} = A$. На каждой k-й итерации для некоторого выбираемого при решении задачи недиагонального элемента $a_{ij}^{(k)}$, $i \neq j$, определяется ортогональная матрица $H^{(k)}$, приводящая этот элемент $a_{ij}^{(k+1)}$ (а также и $a_{ji}^{(k+1)}$) к нулю. При этом на каждой итерации в качестве $a_{ij}^{(k)}$ выбирается наибольший по модулю. Матрица $H^{(k)}$, называемая *матрицей вращения* Якоби, зависит от угла $\varphi^{(k)}$ и имеет вид

$$
H^{(k)} = \begin{array}{c}
\begin{array}{c}
\left(\begin{array}{ccccccccccc}
1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & \cos\varphi^{(k)} & 0 & \cdots & 0 & -\sin\varphi^{(k)} & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & \sin\varphi^{(k)} & 0 & \cdots & 0 & \cos\varphi^{(k)} & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1
\end{array}\right)
\end{array}
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \leftarrow i\text{-я строка} \\ \\ \\ \\ \longleftarrow j\text{-я строка} \\ \\ \\ \\
\end{array}
\\
\begin{array}{cc}
\uparrow & \uparrow \\
i\text{-й столбец} & j\text{-й столбец}
\end{array}
\end{array}.
$$

В данной ортогональной матрице элементы на главной диагонали единичные, кроме $h_{ii}^{(k)} = \cos\varphi^{(k)}$ и $h_{jj}^{(k)} = \cos\varphi^{(k)}$, а $h_{ij}^{(k)} = -\sin\varphi^{(k)}$, $h_{ji}^{(k)} = \sin\varphi^{(k)}$ (h_{ij} – элементы матрицы H).

Угол поворота $\varphi^{(k)}$ определяется по формуле

$$
\operatorname{tg} 2\varphi^{(k)} = \frac{2a_{ij}^{(k)}}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}} = \overline{P}_k; \quad \varphi^{(k)} = \frac{1}{2}\operatorname{arctg} \overline{P}_k,
$$

где $\left|2\varphi^{(k)}\right| \le \frac{\pi}{2}$, $i < j$ (элемент $a_{ij}^{(k)}$ выбирается в верхней треугольной наддиагональной части матрицы A) . Заметим, что при $a_{ii}^{(k)} = a_{jj}^{(k)}$ получается $\varphi^{(k)} = \frac{\pi}{4}$.

В процессе итераций сумма квадратов всех недиагональных элементов $\sigma(A^{(k)})$ при возрастании k уменьшается, так что $\sigma(A^{(k+1)}) < \sigma(A^{(k)})$. Элементы $a_{ij}^{(k)}$, приведенные к нулю на k-й итерации, на последующей итерации немного возрастают. При $k \to \infty$ получается монотонно убывающая ограниченная снизу нулем последовательность $\sigma(A^{(1)}) > \sigma(A^{(2)}) > \cdots > \sigma(A^{(k)}) \cdots$. Поэтому $\sigma(A^{(k)}) \to 0$ при $k \to \infty$. Это и означает сходимость метода. При этом $A^{(k)} \to \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$.

Методика решения задачи

Шаг 1. Положить $k = 0$, $A^{(0)} = A$ и задать $\varepsilon > 0$.

Шаг 2. Выделить в верхней треугольной наддиагональной части матрицы $A^{(k)}$ максимальный по модулю элемент $a_{ij}^{(k)}$, $i < j$.

Если $\left|a_{ij}^{(k)}\right| \le \varepsilon$ для всех $i \ne j$, процесс завершить. Собственные значения определяются по формуле $\lambda_i\left(A^{(k)}\right) = a_{ii}^{(k)}$, $i = \overline{1, n}$.

Собственные векторы X^i находятся как i-е столбцы матрицы, получающейся в результате перемножения:

$$\nu_k = H^{(0)} H^{(1)} H^{(2)} \cdots H^{(k-1)} = \left(X^1, X^2, X^3, \ldots, X^n\right).$$

Если $\left|a_{ij}^{(k)}\right| > \varepsilon$, процесс продолжается.

Шаг 3. Найти угол поворота по формуле

$$\varphi^{(k)} = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2a_{ij}^{(k)}}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}} \quad (\text{при } a_{ii}^{(k)} = a_{jj}^{(k)} \text{ получается } \varphi^{(k)} = \frac{\pi}{4}).$$

Шаг 4. Составить матрицу вращения $H^{(k)}$.

Шаг 5. Вычислить очередное приближение

$$A^{(k+1)} = \left(H^{(k)}\right)^T A^{(k)} H^{(k)}.$$

Положить $k = k + 1$ и перейти к п.2.

З а м е ч а н и я.

1. Контроль правильности выполнения действий на каждой итерации осуществляется путем проверки сохранения следа преобразуемой матрицы.

2. При $n = 2$ для решения задачи требуется одна итерация.

Пример 2. Для матрицы $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ методом вращений найти собственные значения и собственные векторы.

□ 1. Положим $k = 0$, $A^{(0)} = A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$, $\varepsilon = 10^{-10}$.

2^0. Выше главной диагонали имеется только один элемент $a_{ij} = a_{12} = 1$.

3^0. Находим угол поворота матрицы, используя в расчетах 11 цифр после запятой в соответствии с заданной точностью:

$$\operatorname{tg} 2\varphi^{(0)} = \frac{2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}} = \frac{2}{2-3} = -2; \quad \sin\varphi^{(0)} = -0{,}52573111212; \quad \cos\varphi^{(0)} = 0{,}85065080835.$$

4^0. Сформируем матрицу вращения:

$$H^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos\varphi^{(0)} & -\sin\varphi^{(0)} \\ \sin\varphi^{(0)} & \cos\varphi^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}85065080835 & 0{,}52573111212 \\ -0{,}52573111212 & 0{,}85065080835 \end{pmatrix}.$$

5^0. Выполним первую итерацию:

$$A^{(1)} = \left(H^{(0)}\right)^T A^{(0)} H^{(0)} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0{,}85065080835 & -0{,}52573111212 \\ 0{,}52573111212 & 0{,}85065080835 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0{,}85065080835 & 0{,}52573111212 \\ -0{,}52573111212 & 0{,}85065080835 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1{,}38196601125 & -4{,}04620781325 \cdot 10^{-12} \\ -4{,}04587474634 \cdot 10^{-12} & 3{,}61803398874 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, след матрицы с заданной точностью сохраняется, т.е. $\sum_{i=1}^{2} a_{ii}^{(1)} = \sum_{i=1}^{2} a_{ii}^{(0)} = 5$. Положим $k = 1$ и перейдем к п.2.

2^1. Максимальный по модулю наддиагональный элемент $|a_{12}| = 4{,}04620781325 \cdot 10^{-12} < \varepsilon = 10^{-10}$. Для решения задачи (подчеркнем, что $n = 2$) с принятой точностью потребовалась одна итерация, полученную матрицу можно считать диагональной. Найдены следующие собственные значения и собственные векторы:

$$\lambda_1 = 1{,}38196601125; \quad \lambda_2 = 3{,}61803398874;$$

$$X^1 = \begin{pmatrix} 0{,}85065080835 \\ -0{,}52573111212 \end{pmatrix}; \quad X^2 = \begin{pmatrix} 0{,}52573111212 \\ 0{,}85065080835 \end{pmatrix}. \blacksquare$$

Лекция 11

3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть дано нелинейное уравнение

$$f(x) = 0, \tag{3.1}$$

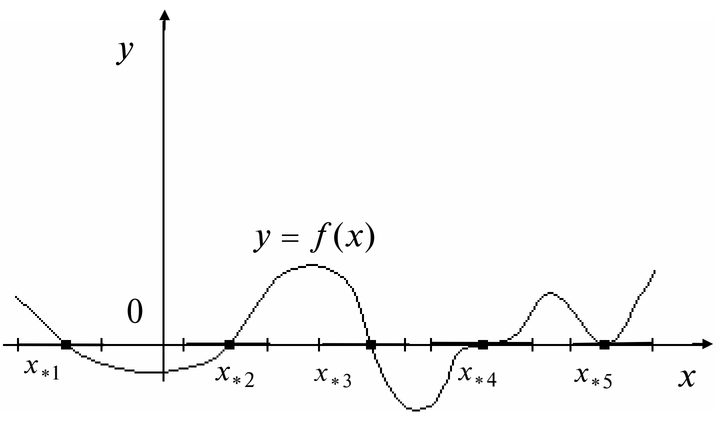
где $f(x)$ – функция, определенная и непрерывная на некотором промежутке. В некоторых случаях на функцию $f(x)$ могут быть наложены дополнительные ограничения, например, непрерывность первой и второй производных, что специально оговаривается. Функция $f(x)$ может быть задана в виде алгебраического многочлена или трансцендентной функции (тогда ей соответствует алгебраическое или трансцендентное уравнение).

Требуется найти *корни* уравнения, т.е. числа $x_{*1}, x_{*2}, \ldots$, которые путем подстановки превращают уравнение в верное числовое равенство. Числа $x_{*1}, x_{*2}, \ldots$ называются также *нулями* функции $f(x)$.

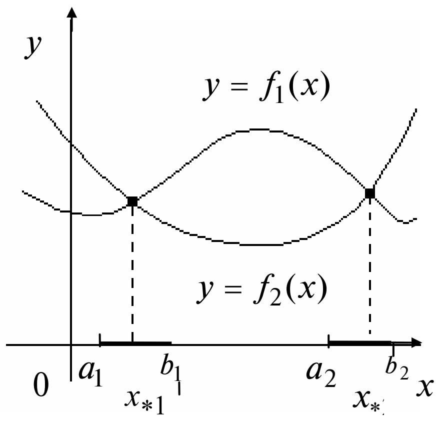
На практике часто бывает выгодно уравнение (3.1) заменить равносильным ему уравнением (уравнения равносильны, если имеют одинаковые корни):

$$f_1(x) - f_2(x) = 0, \tag{3.2}$$

где функции $f_1(x)$, $f_2(x)$ – более простые, чем функция $f(x)$. Тогда при задании уравнения в виде (3.1) нулями функции $f(x)$ являются точки пересечения $f(x)$ с осью Ox (рис.1,*а*), а при задании в виде (3.2) – абсциссы точек пересечения функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ (рис. 1,*б*).



а



б

Рис. 1

Число x_* есть *корень уравнения* (3.1) *кратности* k, если при $x = x_*$ вместе с функцией $f(x)$ обращаются в нуль ее производные до $(k-1)$-го порядка включительно, т.е. $f(x_*) = f'(x_*) = \ldots = f^{(k-1)}(x_*) = 0$, а $f^{(k)}(x_*) \neq 0$. Корень кратности $k = 1$ называется *простым*. На рис. 1,*а* простыми корнями являются x_{*1}, x_{*2}, x_{*3}, а корни x_{*4}, x_{*5} – кратные.

З а м е ч а н и я.

1. Если $f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_0 = P_n(x)$ – алгебраический многочлен, то уравнение (3.1) называется также *алгебраическим* n-й степени:

$$P_n(x) \equiv a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_0 = 0, \tag{3.3}$$

где $a_n, \ldots a_0$ – действительные числа, коэффициенты уравнения.

2. Алгебраическое уравнение n-й степени имеет ровно n корней, действительных или комплексных, при условии, что каждый корень считается столько раз, какова его кратность.

3. Если функция $f(x)$, определяющая уравнение $f(x) = 0$, на концах отрезка $[a_i, b_i]$ принимает значения разных знаков, т.е. $f(a_i) \cdot f(b_i) < 0$, то на этом отрезке содержится по крайней мере один корень уравнения. Если же $f(x)$ непрерывна и дифференцируема и ее первая производная сохраняет знак внутри отрезка $[a_i, b_i]$ $\left(\underset{[a_i, b_i]}{\mathrm{sign}}\, f'(x) = \mathrm{const}\right)$, то на $[a_i, b_i]$ находится только один корень x_{*i} уравнения.

Этапы решения нелинейных уравнений

Первый этап. Находятся отрезки $[a_i, b_i]$, внутри каждого из которых содержится один простой или кратный корень $(x_{*i} \in [a_i, b_i])$ (см. рис.1). Этот этап называется процедурой *отделения корней*. По сути, на нем осуществляется грубое нахождение корней x_{*i}.

Второй этап. Грубое значение каждого корня x_{*i} уточняется до заданной точности одним из численных методов, в которых реализуются последовательные приближения.

Отделение корней

Для отделения действительных корней полезно определять заранее число корней, а также верхнюю и нижнюю границы их расположения.

В вычислительной практике обычно используются следующие *способы отделения корней*:

1) средствами машинной графики: функция $f(x)$ представляется на дисплее и приближенно определяются отрезки, которым принадлежат точки x_{*i};

2) средствами математического анализа с помощью исследования функций и построения графиков (см. рис. 1,*а*);

3) формированием простых функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ таких, что получается равносильное уравнение в виде (3.2), и дальнейшим построением графиков этих функций (см. рис. 1,*б*).

А. МЕТОД ПРОСТЫХ ИТЕРАЦИЙ

Пусть известно, что корень x_* уравнения $f(x)=0$ лежит на отрезке $G=\{a \le x \le b\}$.

Методика решения задачи

Шаг 1. Уравнение $f(x)=0$ равносильным преобразованием привести к виду $x=\varphi(x)$. Это преобразование может быть осуществлено различными путями, но для сходимости нужно обеспечить выполнение условия $|\varphi'(x)| \le \chi < 1$ (χ – некоторая константа). При этом задача сводится к нахождению абсциссы точки пересечения прямой $y=x$ и кривой $y=\varphi(x)$ (рис. 2).

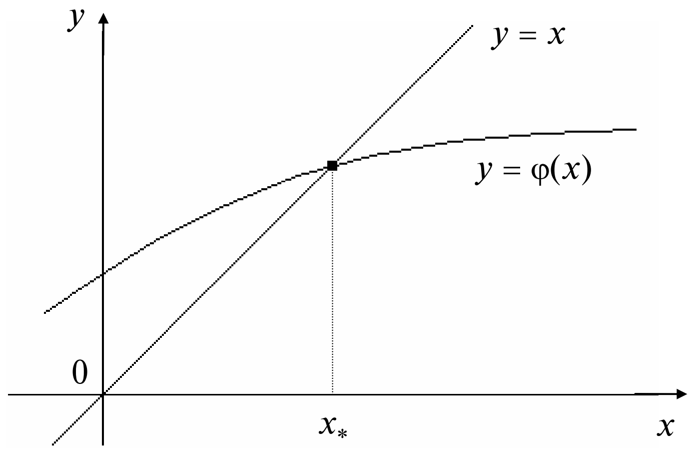


Рис. 2

Шаг 2. Задать начальное приближение $x^{(0)} \in [a,b]$ и малое положительное число ε. Положить $k=0$.

Шаг 3. Вычислить следующее приближение:

$$x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}) .$$

Шаг 4. Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| \le \varepsilon$, итерации завершаются и $x_* \cong x^{(k+1)}$. Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| > \varepsilon$, положить $k=k+1$ и перейти к п.3.

Теорема (о достаточном условии сходимости метода простых итераций).

Пусть выполнены условия:

1. Функция $\varphi(x)$ *имеет производные для всех* $x \in G$.

2. Существует число χ $(0 \le \chi < 1,\ \chi = \mathrm{const})$, *такое, что* $|\varphi'(x)| \le \chi$ *для всех* $x \in G$.

Тогда последовательность $x^{(0)}, x^{(1)}, \ldots, x^{(k+1)}, \ldots$, *определяемая на основе итерационного процесса, сходится к решению* x_*, *т.е.* $x^{(k)} \to x_*$ *при* $k \to \infty$.

Геометрическая интерпретация процесса сходимости и расходимости в зависимости от выполнения или невыполнения достаточного условия сходимости представлена на рис. 3. Из рис. 3 видно, что при $0 < \varphi'(x) < 1$ и при $-1 < \varphi'(x) < 0$ (см. рис. 3, *а, б*) итерационные последовательности $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots$ сходятся к x_*. Причем в первом случае реализуется односторонняя (монотонная) сходимость, а во втором – двусторонняя (немонотонная). При $|\varphi'(x)| > 1$ (см. рис. 3, *в, г*) процесс расходится, несмотря на то, что точка $x^{(0)}$ очень близка к x_*.

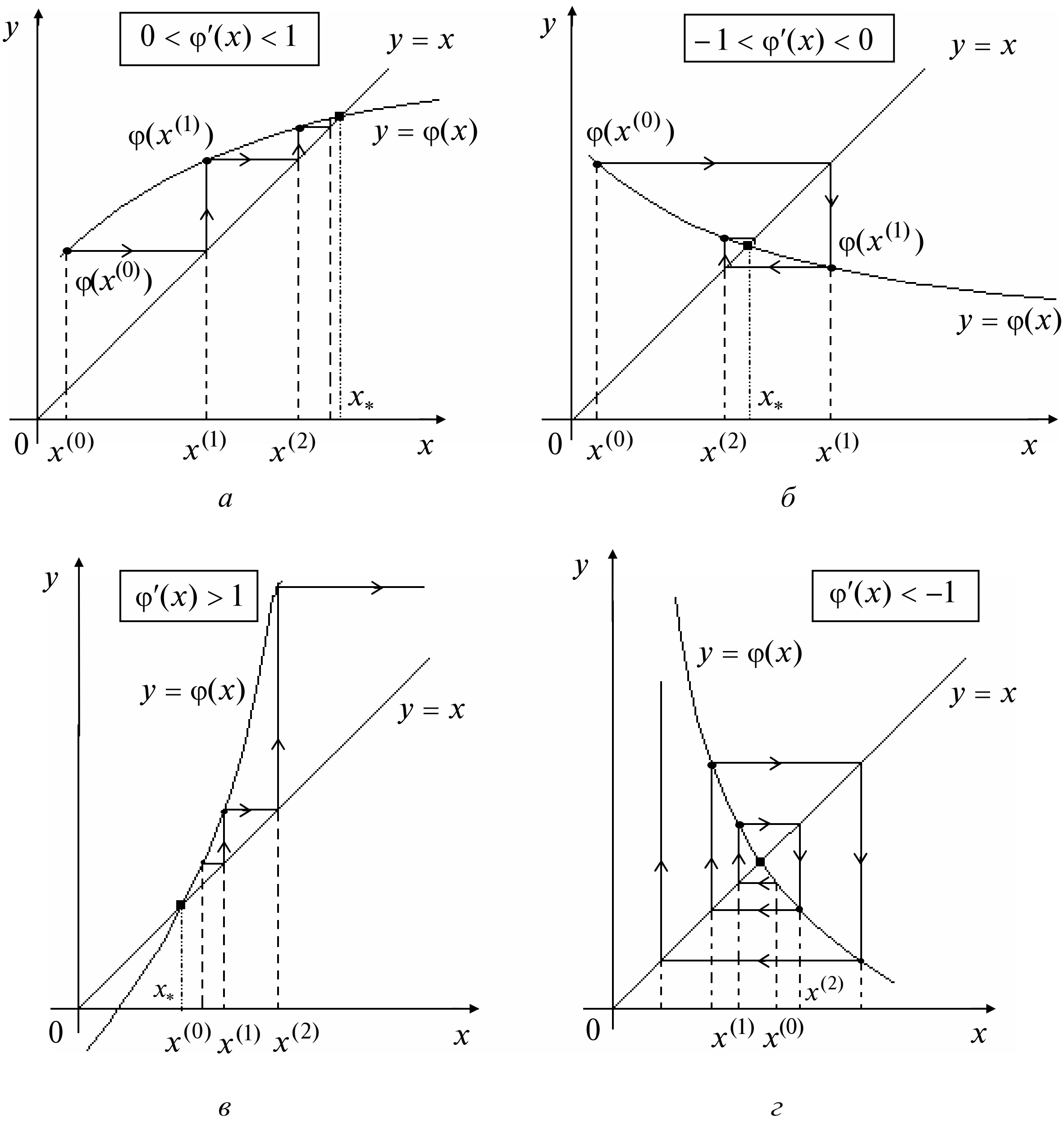


Рис. 3

Способы преобразования уравнения

Преобразование уравнения $f(x)=0$ к равносильному виду $x=\varphi(x)$ может быть выполнено неоднозначно.

1. Можно заменить уравнение $f(x)=0$ на равносильное $x=x+cf(x)$, где $c=\text{const}\neq 0$. Тогда, принимая правую часть этого уравнения за $\varphi(x)$ и раскрывая $|\varphi'(x)|=|1+cf'(x)|<1$, получаем условие

$$-2<cf'(x)<0.$$

При этом надо стремиться получить такую постоянную c, которая бы больше отличалась от нуля, и тогда будет реализовываться более быстрая сходимость.

2. Уравнение $f(x)=0$ заменяется равносильным:

$$x=x\mp\frac{f(x)}{\max|f'(x)|}\equiv\varphi(x) \text{ при } x\in G,$$

где знак в правой части выбирается из условия $|\varphi'(x)|<1$.

3. Можно выразить x из уравнения $f(x)=0$ так, чтобы для полученного уравнения $x=\varphi(x)$ выполнялось условие сходимости $|\varphi'(x)|<1$ в окрестности искомого корня.

Б. МЕТОД НЬЮТОНА

Метод Ньютона (*метод касательных*) является одним из наиболее популярных численных методов. Он реализуется по формуле:

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

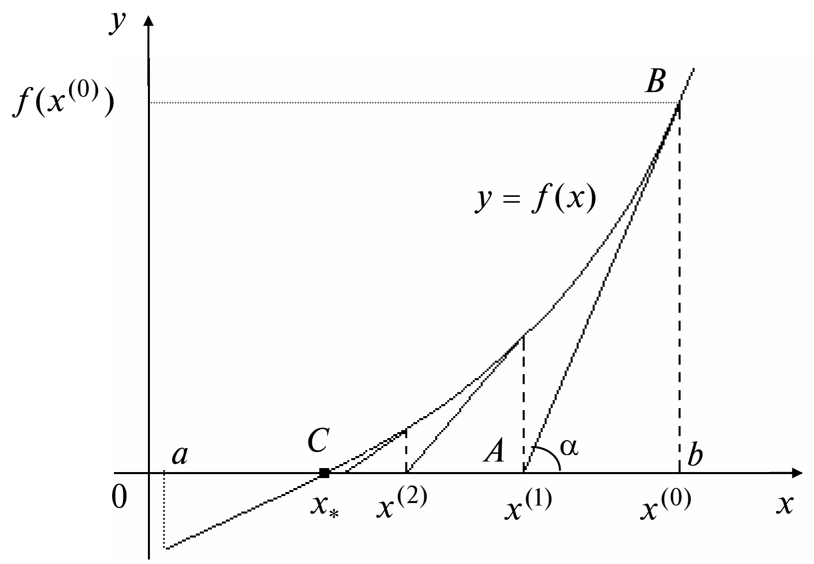


Рис. 4

В точке $x^{(0)}$ строится касательная к графику функции. Следующей точкой $x^{(1)}$ является точка пересечения касательной с осью абсцисс. Далее процесс продолжается аналогично.

Теорема (о достаточных условиях сходимости метода Ньютона).

Пусть выполняются следующие условия:

1. Функция $f(x)$ определена и дважды дифференцируема на $[a,b]$.

2. Отрезку $[a,b]$ принадлежит только один простой корень x_*, так что $f(a)\cdot f(b)<0$.

3. Производные $f'(x), f''(x)$ на $[a,b]$ сохраняют знак, и $f'(x)\neq 0$.

4. Начальное приближение $x^{(0)}$ удовлетворяет неравенству $f(x^{(0)})\cdot f''(x^{(0)})>0$ (знаки функций $f(x)$ и $f''(x)$ в точке $x^{(0)}$ совпадают).

Тогда с помощью метода Ньютона можно вычислить корень уравнения $f(x)=0$ с любой точностью.

В. МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА НЬЮТОНА

В1. **Упрощенный метод Ньютона.** Вместо формулы метода Ньютона используется

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f'\left(x^{(0)}\right)}, \quad k = 0,1,\ldots$$

Отличие от метода Ньютона заключается в том, что производная функции $f(x)$ подсчитывается только в точке начального приближения, а на последующих итерациях не уточняется. Процесс последовательных приближений отражен на рис. 5. Первая итерация совпадает с первой итерацией метода Ньютона. На последующих итерациях соответствующие отрезки параллельны касательной, проведенной в начальной точке.

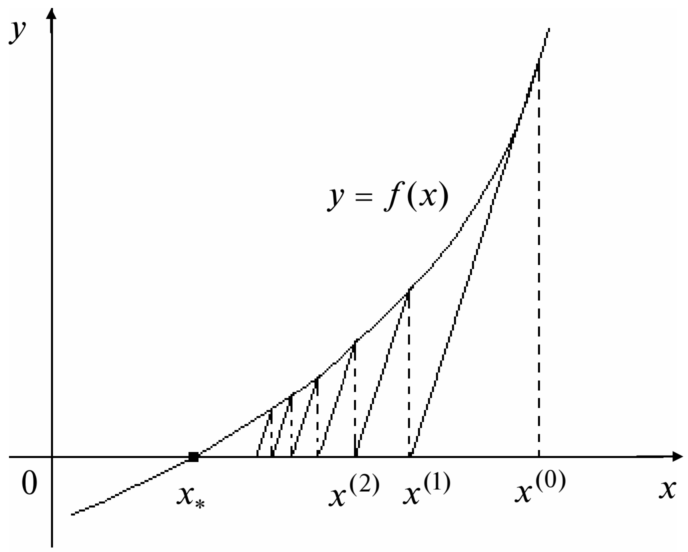


Рис. 5

В2. Метод Ньютона–Бройдена. Этот метод позволяет увеличить скорость сходимости последовательных приближений благодаря использованию формулы

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - c_k \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f'\left(x^{(k)}\right)}, \quad k = 0,1,\ldots,$$

где c_k – число, которое выбирается на каждой итерации так, чтобы уменьшить значение $\left|f\left(x^{(k+1)}\right)\right|$ по сравнению с $\left|f\left(x^{(k)}\right)\right|$. При $c_k = 1$ метод Ньютона–Бройдена совпадает с методом Ньютона.

Как правило, при плохой сходимости или ее отсутствии полагают $0 < c_k < 1$, а при хорошей сходимости для $c_k = 1$ полагают $c_k > 1$ (это ускоряет сходимость).

В3. Метод секущих. В этом методе производная функции $f(x)$ подсчитывается с помощью конечно-разностных соотношений:

– в точке $x^{(0)}$ используется формула $f'\left(x^{(0)}\right) \approx \dfrac{f\left(x^{(0)}\right) - f\left(x^{(0)} - \delta\right)}{\delta}$,

где δ – малая положительная величина;

– в точках $x^{(k)}$, $k = 1,2,\ldots$, используется формула $f'\left(x^{(k)}\right) \approx \dfrac{f\left(x^{(k)}\right) - f\left(x^{(k-1)}\right)}{x^{(k)} - x^{k-1}}$.

Вычисленное значение $f'(x^{(k)})$ определяет тангенс угла наклона секущей (рис. 6).

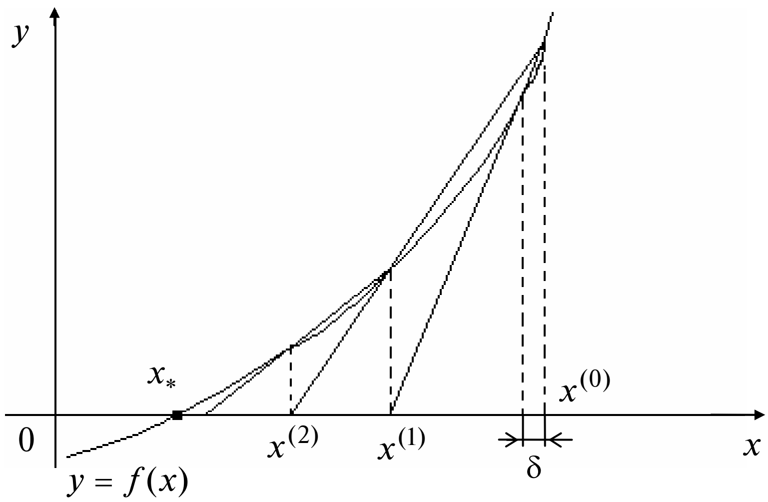


Рис. 6

Используется формула

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f\left(x^{(k)}\right) - f\left(x^{(k-1)}\right)} \cdot \left(x^{(k)} - x^{(k-1)}\right), \quad k = 1,2,\ldots$$

Г. МЕТОД ПОЛОВИННОГО ДЕЛЕНИЯ

Пусть дано уравнение $f(x) = 0$ и отделен простой корень x_*, т.е. найден такой отрезок $[a_0, b_0]$, что $x_* \in [a_0, b_0]$, и на концах отрезка функция имеет значения, противоположные по знаку ($f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$). Отрезок $[a_0, b_0]$ называется *начальным интервалом неопределенности*, потому что известно, что корень ему принадлежит, но его местоположение с требуемой точностью не определено.

Процедура уточнения положения корня заключается в построении последовательности вложенных друг в друга отрезков, каждый из которых содержит корень уравнения. Для этого находится середина текущего интервала неопределенности $c_k = \dfrac{a_k + b_k}{2}$, $k = 0,1,\ldots$, и в качестве следующего интервала неопределенности из двух возможных выбирается тот, на концах которого функция $f(x)$ имеет разные знаки (рис. 7).

Процесс завершается, когда длина текущего интервала неопределенности становится меньше заданной величины ε, задающей точность нахождения корня. В качестве приближенного значения корня берется середина последнего интервала неопределенности.

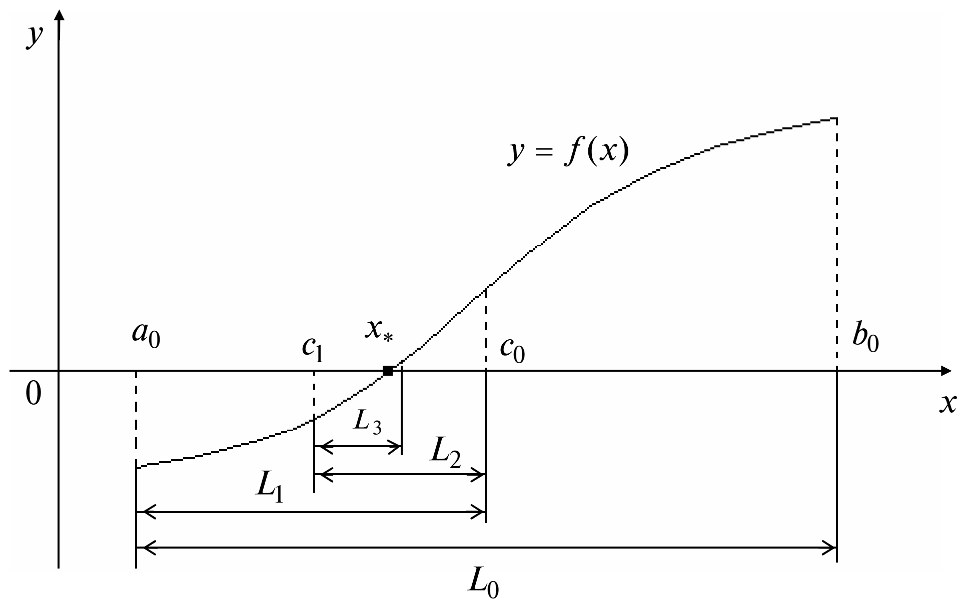


Рис. 7

Д. МЕТОД ХОРД

Этот метод при тех же предположениях обеспечивает более быстрое нахождение корня, чем метод половинного деления. Для этого отрезок $[a,b]$ делится не пополам, а в отношении $|f(a)| : |f(b)|$.

Геометрически метод хорд эквивалентен замене кривой $y = f(x)$ хордой, проходящей через точки $(a, f(a))$ и $(b, f(b))$ (рис. 8).

Уравнение хорды AB имеет вид $\dfrac{x-a}{b-a} = \dfrac{y - f(a)}{f(b) - f(a)}$. Полагая $x = x^{(1)}$ и $y = 0$, получаем $x^{(1)} = a - \dfrac{f(a)}{f(b) - f(a)}\ (b - a)$.

Предположим, что вторая производная $f''(x)$ сохраняет постоянный знак, и рассмотрим два случая: $f(a) > 0,\ \ f''(x) > 0$ (рис. 9,*а*) и $f(a) < 0,\ \ f''(x) > 0$ (рис. 9,*б*). Случай $f''(x) < 0$ сводится к рассматриваемому, если уравнение записать в форме: $-f(x) = 0$.

Первому случаю (см. рис. 9,*а*) соответствует формула

$$x^{(0)} = b,$$
$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f\left(x^{(k)}\right) - f(a)} \left(x^{(k)} - a\right), \quad k = 0,1,..., \tag{I}$$

а второму случаю (см. рис. 9,*б*) :

$$x^{(0)} = a,$$
$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f(b) - f\left(x^{(k)}\right)} \cdot \left(b - x^{(k)}\right), \quad k = 0,1,... \tag{II}$$

В первом случае остается неподвижным конец a, а во втором случае - конец b.

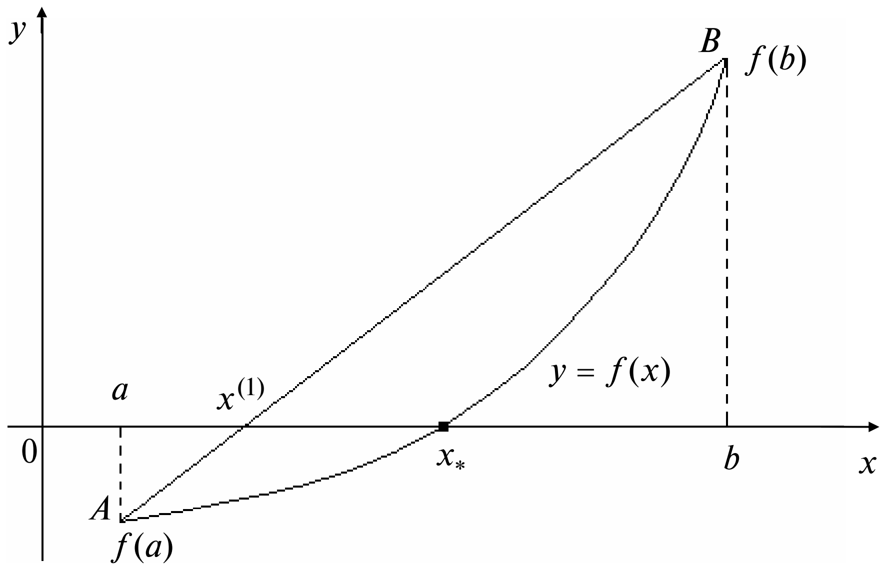


Рис. 8

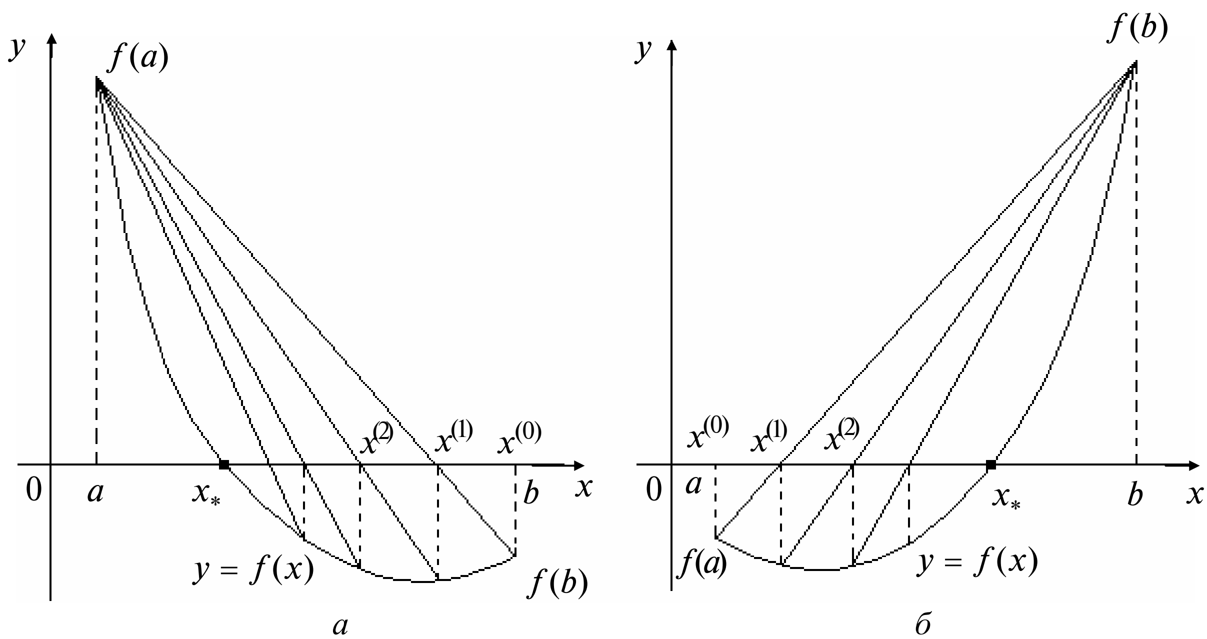


Рис. 9

З а м е ч а н и е. Для выявления неподвижного конца используется условие $f''(x) \cdot f(t) > 0$, где $t = a$ или $t = b$. Если неподвижен конец *а*, применяется формула (I), а если конец b, – формула (II).

Лекция 12

4. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана система n нелинейных уравнений с n неизвестными:

$$\begin{aligned} &f_1(x_1,\dots,x_n)=0,\\ &f_2(x_1,\dots,x_n)=0,\\ &\vdots\\ &f_n(x_1,\dots,x_n)=0, \end{aligned} \tag{4.1}$$

где $f_i(x_1,\dots,x_n): R^n \to R$, $i=1,\dots,n$, – нелинейные функции, определенные и непрерывные в некоторой области $G \subset R^n$, или в векторном виде

$$F(x)=0,$$

где $x=(x_1,\dots,x_n)^T$, $F(x)=[f_1(x),\dots,f_n(x)]^T$.

Требуется найти такой вектор $x_* = (x_{*1},\dots,x_{*n})^T$, который при подстановке в систему превращает каждое уравнение в верное числовое равенство.

Замечания.

1. Для всех рассматриваемых далее методов требуется находить начальное приближение $x^{(0)}$. В случае $n=2$ это можно сделать графически, определив координаты точки пересечения кривых, описываемых уравнениями $f_1(x_1,x_2)=0$ и $f_2(x_1,x_2)=0$.

2. Задача решения системы может быть сведена к задаче поиска минимума функции $\Psi(x)=\sum\limits_{i=1}^{n} f_i^2(x_1,\dots,x_n)$. Так как функция $\Psi(x)$ неотрицательная, ее минимальное значение, равное нулю, достигается в точке x_*, являющейся решением системы. Для поиска минимума функции $\Psi(x)$ можно применить различные методы поиска безусловного экстремума функций многих переменных (первого, второго, нулевого порядков).

А. МЕТОД ПРОСТЫХ ИТЕРАЦИЙ

Для применения метода требуется привести систему (4.1) к равносильному виду:

$$\begin{aligned} &x_1=\varphi_1(x_1,\dots,x_n),\\ &x_2=\varphi_2(x_1,\dots,x_n),\\ &\vdots\\ &x_n=\varphi_n(x_1,\dots,x_n), \end{aligned} \tag{4.2}$$

или в векторной форме

$$x=\Phi(x),$$

где $x = (x_1, ..., x_n)^T$, $\Phi(x) = [\varphi_1(x), ..., \varphi_n(x)]^T$, функции $\varphi_i(x)$ определены и непрерывны в окрестности изолированного решения x_* системы.

Методика решения задачи

Шаг 1. Задать начальное приближение $x^{(0)} = (x_{10}, x_{20}, ..., x_{n0})^T$ и малое положительное число ε (точность). Положить $k = 0$.

Шаг 2. Вычислить $x^{(k+1)}$ по формуле

$$x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)}),$$

или

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \varphi_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}), \\ x_2^{(k+1)} &= \varphi_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}), \\ &\vdots \\ x_n^{(k+1)} &= \varphi_n(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, ..., x_n^{(k)}). \end{aligned}$$

Шаг 3. Если $\Delta^{(k+1)} = \max\limits_i \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| \le \varepsilon$, процесс завершен и $x_* \cong x^{(k+1)}$. Если $\Delta^{(k+1)} > \varepsilon$, то положить $k = k + 1$ и перейти к п.2.

Замечания. Итерационный процесс соответствует *параллельному итерированию,* так как для вычисления $(k+1)$-го приближения всех неизвестных учитываются вычисленные ранее их k-е приближения.

Теорема (о достаточном условии сходимости метода простых итераций).

Пусть функции $\varphi_i(x)$ и $\varphi_i'(x)$, $i = 1, ..., n$, непрерывны в области G, причем выполнено неравенство

$$\max_{x \in G} \max_i \sum_{j=1}^{n} \left| \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j} \right| \le q < 1,$$

где q – некоторая постоянная.

Если последовательные приближения $x^{(k+1)} = \Phi(x^{(k)})$, $k = 0,1,...$, не выходят из области G, то процесс последовательных приближений сходится: $x_* = \lim\limits_{k \to \infty} x^{(k)}$ и вектор x_* является в области G единственным решением системы.

Б. МЕТОД ЗЕЙДЕЛЯ

Метод Зейделя предназначен для решения систем, записанных в форме (4.2). Этот метод является модификацией метода простых итераций, где после задания начального приближения $x^{(0)}$ вместо параллельного итерирования производится *последовательное итерирование*, причем на каждой итерации в каждое последующее уравнение подставляются значения неизвестных, полученных из предыдущих уравнений.

Методика решения задачи

Шаг 1. Задать начальное приближение $x^{(0)}$ и малое положительное число ε (точность). Положить $k = 0$.

Шаг 2. Вычислить $x^{(k+1)}$ по формулам

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \varphi_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}),\\
x_2^{(k+1)} &= \varphi_2(\boxed{x_1^{(k+1)}}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}),\\
&\vdots\\
x_n^{(k+1)} &= \varphi_n(\boxed{x_1^{(k+1)}}, \boxed{x_2^{(k+1)}}, \dots, \boxed{x_{n-1}^{(k+1)}}, x_n^{(k)}),
\end{aligned}
$$

где прямоугольниками отмечены значения, которые берутся из предшествующих уравнений на текущей итерации.

Шаг 3. Если $\Delta^{(k+1)} = \max\limits_i \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| \le \varepsilon$, процесс завершить и положить $x_* \cong x^{(k+1)}$. Если $\Delta^{(k+1)} > \varepsilon$, то положить $k = k + 1$ и перейти к п.2.

В. МЕТОД НЬЮТОНА

Метод используется для решения систем вида (4.1).

Формула для нахождения решения является естественным обобщением формулы метода Ньютона для решения одного уравнения:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - W^{-1}(x^{(k)}) \cdot F(x^{(k)}), \quad k = 0,1,\dots,$$

где

$$W(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \dfrac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \dots & \dfrac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \text{ – матрица Якоби.}$$

Так как процесс вычисления обратной матрицы является трудоемким, преобразуем формулу следующим образом:

$$\Delta x^{(k)} = -W^{-1}(x^{(k)}) \cdot F(x^{(k)}), \quad k = 0,1,\dots,$$

где $\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}$ – поправка к текущему приближению $x^{(k)}$.

Умножим последнее выражение слева на матрицу Якоби $W(x^{(k)})$:

$$W(x^{(k)})\,\Delta x^{(k)} = -W(x^{(k)})\,W^{-1}(x^{(k)})F(x^{(k)}) = -F(x^{(k)}), \quad k = 0,1,\dots$$

В результате получена система линейных алгебраических уравнений относительно поправки $\Delta x^{(k)}$. После ее определения вычисляется следующее приближение $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}$.

Методика решения задачи

Шаг 1. Задать начальное приближение $x^{(0)}$ и малое положительное число ε (точность). Положить $k=0$.

Шаг 2. Решить систему линейных алгебраических уравнений относительно поправки $\Delta x^{(k)}$: $W(x^{(k)})\cdot \Delta x^{(k)}=-F(x^{(k)})$.

Шаг 3. Вычислить следующее приближение:

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\Delta x^{(k)}.$$

Шаг 4. Если $\Delta^{(k+1)}=\max\limits_i \left|x_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right|\le\varepsilon$, процесс закончить и положить $x_*\cong x^{(k+1)}$. Если $\Delta^{(k+1)}>\varepsilon$, то положить $k=k+1$ и перейти к п.2.

Г. МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА НЬЮТОНА

Г1. Упрощенный метод Ньютона. В этом методе в отличие от метода Ньютона обратная матрица ищется только один раз в начальной точке $x^{(0)}$:

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-W^{-1}(x^{(0)})\cdot F(x^{(k)}),\qquad k=0,1,\ldots$$

Заметим, что при решении одного уравнения $f(x)=0$ упрощенным методом Ньютона производная функции вычисляется также один раз в начальной точке.

Методика решения задачи аналогична применению метода Ньютона, где используется система $W(x^{(0)})\cdot\Delta x^{(k)}=-F(x^{(k)}),\quad k=0,1,\ldots$, матрица которой $W(x^{(0)})$ не изменяется от итерации к итерации.

Очевидно, сходимость упрощенного метода Ньютона в общем случае хуже.

Г2. Метод секущих. Идея метода секущих (*метода Бройдена*) заключается в аппроксимации матрицы Якоби с использованием уже вычисленных значений функций, образующих систему.

Методика решения задачи

Шаг 1. Задать начальное приближение $x^{(0)}$ и малое положительное число ε.

Шаг 2. Положить $k=0$ и $A_0=W(x^{(0)})$, где $W(x)$ – матрица Якоби.

Шаг 3. Решить систему линейных алгебраических уравнений $A_k s_k=-F(x^{(k)})$ относительно s_k – поправки к текущему приближению.

Шаг 4. Вычислить $x^{(k+1)}=x^{(k)}+s_k$.

Шаг 5. Если $\|s_k\|\le\varepsilon$, процесс завершить и положить $x_*=x^{(k+1)}$. Если $\|s_k\|>\varepsilon$, вычислить $y_k=F(x^{(k+1)})-F(x^{(k)})$, $A_{k+1}=A_k+\dfrac{(y_k-A_k s_k)\cdot s_k^T}{s_k^T s_k}$, положить $k=k+1$ и перейти к п.3.

Лекция 13

5. МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматриваются *сеточные* (табличные) *функции*

$$y_i = f(x_i), \quad x_i \in [a,b], \quad i = \overline{0,n}, \tag{5.1}$$

определенные в *узлах* x_i $(i = \overline{0,n})$ *сетки* Ω_n. Каждая сетка характеризуется шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ неравномерного или ($h_{i+1} = \text{const}$) равномерного разбиения.

Однако значения функции должны быть известны при любом значении аргумента $x \neq x_i$, а в самих узлах x_i, как правило, требуется знать также первые и вторые производные, поэтому сеточные функции $y_i = f(x_i)$ необходимо *восполнять*. Данная проблема решается с помощью методов *теории приближений* путем выбора функции $y = F(x,\overline{a})$, зависящей от вектора $\overline{a} = (a_0, a_1, ..., a_m)^T$ неизвестных параметров, где m - число параметров.

Если требуется, чтобы искомая функция $y = F(x,\overline{a})$ проходила через все заданные точки, определенные сеточной функцией, то вектор неизвестных параметров находится *из условия интерполяции*:

$$F(x_i,\overline{a}) = f(x_i) = y_i, \quad i = \overline{0,n}. \tag{5.2}$$

При этом способ приближения называется *интерполяцией*, а искомая функция *интерполяционным многочленом* (*полиномом*), график которого изображен на рис. 1,а.

Если узлы и значения сеточной функции получены в ходе эксперимента и содержат случайные ошибки, то с практической точки зрения нет смысла требовать прохождения искомой функции через заданный набор точек. В этом случае логичнее *сгладить* экспериментальные данные и найти достаточно простую зависимость, характеризующую взаимосвязь между значениями аргумента и величиной функции. С этой целью вектор неизвестных параметров ищется из *интегрального условия*

$$\Delta = \sqrt{\frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}\left[\, F(x_i,\overline{a}) - f(x_i)\,\right]^2} \to \min_{\overline{a}} \quad (m \le n). \tag{5.3}$$

Условие (5.3) выражает минимум *среднеквадратичной погрешности* (или отклонения) представления заданной сеточной функции $f(x_i), i = \overline{0,n}$, с помощью функции $F(x,\overline{a})$. Оно относится, как правило, ко всей области определения функции $f(x_i)$, т.е. к отрезку $[a,b]$. Сомножитель $\dfrac{1}{n+1}$ иногда опускают, так как его наличие или отсутствие влияет только на величину погрешности, но не влияет на вектор $\overline{a}$, обеспечивающий ее минимум. Задача (5.3) называется задачей *интегрального сглаживания* (*задачей аппроксимации,* или приближенной замены), искомая функция – *аппроксимирующей функцией* (рис.1,б), а используемый метод решения задачи аппроксимации – *точечным методом наименьших квадратов*.

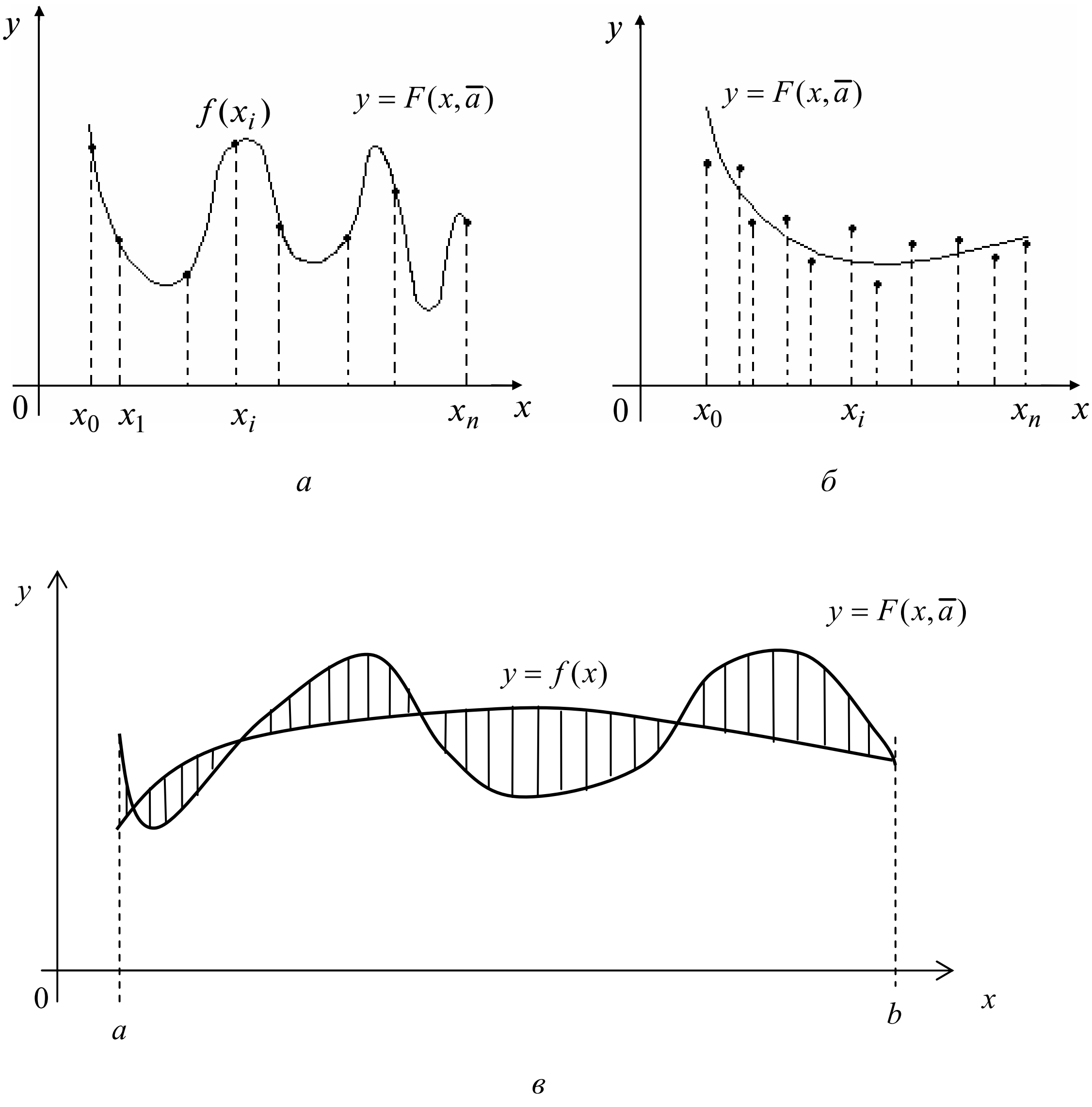


Рис. 1

Для *восполнения* исходных функций $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, искомыми функциями $y = F(x, \overline{a})$ обычно используются алгебраические многочлены

$$f_m(x, \overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j = a_0 + a_1 x + ... + a_m x^m,$$

где $\overline{a} = (a_0, a_1, ..., a_m)^T$ – вектор неизвестных параметров, m – степень многочлена (на практике $m \le n$).

Можно выделить четыре способа применения методов приближения сеточных функций, отличающихся областями их «действия».

1. *Глобальный* способ, в котором для всей области $\Omega \equiv [a, b]$ определяется одна функция $f_m(x, \overline{a})$.

2. *Локальный* способ, когда функция восполняется только в окрестности некоторой точки x_i. Это восполнение обычно осуществляется на основе формулы Тейлора.

3. *Кусочный* способ, когда ищется одна или несколько функций $f_{ki}(x, \overline{a})$ $, i = 0,1,..$, каждая из которых является многочленом степени k и имеет область определения в виде частичного отрезка $\Omega_{ik} = [x_i, x_{i+k}]$ $(1 \le k < n,\ k = 1,2,..)$, называемого «окном» аппроксимации, которое составляет *шаблон* $(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k})$. Саму функцию $f_{ki}(x, \overline{a})$, построенную на одном шаблоне, будем называть *звеном*.

4. *Кусочно-глобальный* способ, в котором область Ω представляется совокупностью N непересекающихся частичных отрезков Ω_{ik}, таких, что $\Omega = \bigcup\limits_{i=1}^{N} \Omega_{ik}$. На первом этапе на каждом из отрезков ищется функция $f_{ki}(x, \overline{a})$ – i-е звено с применением кусочного способа аппроксимации. На следующем этапе производится объединение всех звеньев в одну многозвенную функцию, т.е. $f_k(x, \overline{a}) = \bigcup\limits_{i=1}^{N} f_{ki}(x, \overline{a})$. Данный способ применяется, например, при построении сплайнов.

Если на отрезке $[a, b]$ задана квадратично интегрируемая функция $y = f(x)$, которая по каким-либо причинам трудна для использования (например, трудно вычислить производные), то может быть поставлена задача ее аппроксимации более простой функцией $y = F(x, \overline{a})$. Вектор неизвестных параметров $\overline{a}$ ищется из *интегрального условия*:

$$\Delta = \int\limits_a^b [F(x, \overline{a}) - f(x)]^2 \, dx \to \min_{\overline{a}}.$$

Искомая функция $y = F(x, \overline{a})$ называется *аппроксимирующей функцией*, а метод аппроксимации – *интегральным методом наименьших квадратов*. При решении этой задачи минимизируется заштрихованная площадь на рис. 1, в.

МЕТОДЫ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

А. ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МНОГОЧЛЕН ЛАГРАНЖА

Пусть на множестве $\Omega = [a, b]$ задана сетка $\Omega_n = \left\{x_i,\ i = \overline{0, n}\right\}$, определяемая $n + 1$ точкой $x_0, x_1, ..., x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i),\ i = \overline{0, n}$:

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), ..., y_n = f(x_n),$$

где $x_i \in [a,b] = [x_0, x_n]$ - в общем случае неравноотстоящие узлы, определяемые шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \text{var}$), $i = \overline{0, n-1}$.

В некоторых случаях $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, является сеточным представлением заданной формульной функции $y = f(x)$. Сеточная функция может задаваться совокупностью пар: $(x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)$.

Требуется найти функцию $y = F(x, \overline{a})$, принимающую в точках $x_0, x_1, ..., x_n$ те же значения, что и функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, т.е. $F(x_i) = y_i$, $i = \overline{0, n}$.

Точки $x_0, x_1, ..., x_n$ называются *узлами интерполяции*, а искомая функция $y = F(x, \overline{a})$ – *интерполирующей.*

Геометрически это означает, что нужно найти кривую, проходящую через заданное множество точек $(x_i, y_i), i = \overline{0, n}$ (рис.2).

Одной из целей решения задачи интерполяции является вычисление значения функции в произвольной точке x_* (или точках $x_{*j}, j = 1, ..., p$). При этом различаются собственно *интерполирование*, когда точка $x_* \in [x_0, x_n]$, и *экстраполирование*, когда $x_* \notin [x_0, x_n]$.

Заметим, что можно провести бесчисленное множество «плавных» кривых, проходящих через заданное множество точек. Поэтому задача интерполяции в общей постановке не имеет единственного решения.

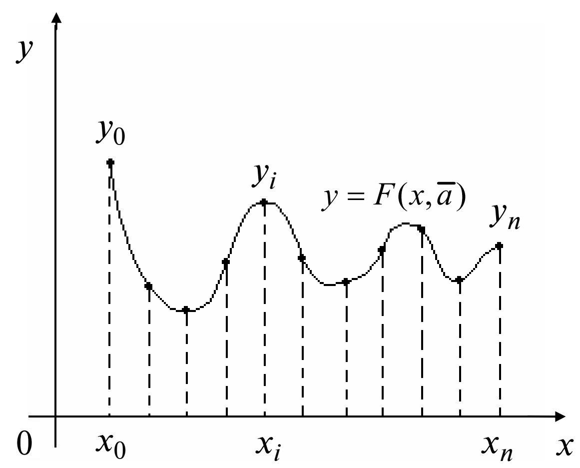


Рис. 2

Теорема (о единственности решения задачи интерполяции). *Если сеточная функция задана в* $(n+1)$*-м узле* $x_0, x_1, ..., x_n$, *а в качестве интерполирующей функции* $y = F(x, \overline{a})$ *выбран многочлен n-й степени* (*степень многочлена на единицу меньше числа узлов интерполяции*), т.е.

$$F(x, \overline{a}) = f_n(x, \overline{a}) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j = a_0 + a_1 x + ... + a_n x^n,$$

то задачи интерполяции имеет единственное решение.

Значения коэффициентов $a_0, a_1, ..., a_n$ можно найти из системы уравнений, следующей из условия интерполяции:

$$\begin{aligned} & a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + ... + a_n x_0^n = y_0, \\ & a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + ... + a_n x_1^n = y_1, \\ & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ & a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + ... + a_n x_n^n = y_n. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Эта система линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов $a_0, a_1, ..., a_n$ имеет единственное решение, так как определитель матрицы системы не равен нулю (доказательство последнего факта содержится в курсе линейной алгебры, где этот определитель называется определителем Вандермонда). Следовательно, задача интерполяции также имеет единственное решение. Описанная процедура соответствует глобальному способу решения поставленной задачи.

Методика решения задачи интерполяции

Шаг 1. По заданной сеточной функции составить интерполяционный многочлен соответствующей степени.

Шаг 2. Вычислить значения интерполяционного многочлена в заданных точках $x_{*j}, j = 1, ..., p$, путем их подстановки в формулу многочлена

Замечания.

1. Имеются различные формы записи интерполяционных многочленов. По теореме все эти многочлены степени n, удовлетворяющие условиям интерполяции и построенные по одним и тем же точкам, являются одним многочленом, записанным в разных формах.

2. При $n \geq 7$ график интерполяционного многочлена, как правило, имеет колебательный характер, т.е. содержит значительные «провалы» или «всплески» между узлами интерполяции, что весьма неудобно на практике.

При большом числе узлов решение системы (5.4) затруднительно. Искомый интерполяционный многочлен можно построить, не решая этой системы. Многочлены могут быть построены так, чтобы в самой структуре формулы многочлена условие интерполяции учитывалось. Примерами таких многочленов являются интерполяционные многочлены Лагранжа и Ньютона.

Интерполяционный многочлен Лагранжа n-й степени имеет вид

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) ... (x - x_{i-1}) \cdot (x - x_{i+1}) ... (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdot (x_i - x_1) ... (x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1}) ... (x_i - x_n)} f_i =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} P_{ni}(x) \cdot f_i,$$

где *коэффициенты Лагранжа* $P_{ni}(x)$ во внутренних точках отрезка записываются в форме $P_{ni}(x) = \dfrac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) ... (x - x_{i-1}) \cdot (x - x_{i+1}) ... (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdot (x_i - x_1) ... (x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1}) ... (x_i - x_n)}$.

Многочлен $L_n(x)$ является многочленом степени n и удовлетворяет условиям интерполяции: $L_n(x_i) = f_i$, $i = \overline{0, n}$.

Для записи интерполяционного многочлена Лагранжа удобно пользоваться табл.1.

Таблица 1

$x - x_0$	$x_0 - x_1$	$x_0 - x_2$	...	$x_0 - x_n$	D_0	f_0
$x_1 - x_0$	$x - x_1$	$x_1 - x_2$	...	$x_1 - x_n$	D_1	f_1
$x_2 - x_0$	$x_2 - x_1$	$x - x_2$	...	$x_2 - x_n$	D_2	f_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_n - x_0$	$x_n - x_1$	$x_n - x_2$	...	$x - x_n$	D_n	f_n
$\Pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \cdot \ldots \cdot (x - x_n)$					D_i	f_i

Здесь D_i – произведение элементов i-й строки, $\Pi_{n+1}(x)$ – произведение элементов главной диагонали. Тогда многочлен Лагранжа может быть записан в форме

$$L_n(x) = \Pi_{n+1}(x) \sum_{i=0}^{n} \frac{f_i}{D_i}.$$

Замечания.

1. При введении дополнительных узлов интерполяции все коэффициенты многочлена Лагранжа необходимо пересчитывать заново, что неудобно на практике. От этого недостатка свободны многочлены Ньютона.

2. Выделим «окно» или частичный отрезок $[x_i, x_{i+1}]$, содержащий только две точки (шаблон (x_i, x_{i+1})). Тогда многочлен Лагранжа, интерполирующий исходную функцию на данном шаблоне, имеет вид

$$L_1(x) = \frac{(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i+1})} f_i + \frac{(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} f_{i+1}.$$

Действительно, легко убедиться в том, что $L_1(x)$ – алгебраический многочлен первой степени, который удовлетворяет условиям интерполяции, т.е. $L_1(x_i) = f_i$, $L_1(x_{i+1}) = f_{i+1}$. Полученный многочлен соответствует *линейной интерполяции*, так как графиком функции является прямая линия.

3. Выделим «окно» в виде двойного частичного отрезка $[x_i, x_{i+2}]$ с шаблоном (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}). Тогда многочлен Лагранжа записывается в виде

$$L_2(x) = \frac{(x - x_{i+1}) \cdot (x - x_{i+2})}{(x_i - x_{i+1}) \cdot (x_i - x_{i+2})} f_i + \frac{(x - x_i) \cdot (x - x_{i+2})}{(x_{i+1} - x_i) \cdot (x_{i+1} - x_{i+2})} f_{i+1} +$$

$$+ \frac{(x - x_i) \cdot (x - x_{i+1})}{(x_{i+2} - x_i) \cdot (x_{i+2} - x_{i+1})} f_{i+2}.$$

Легко проверить, что $L_2(x)$ – многочлен второй степени и также удовлетворяет условиям функциональной интерполяции: $L_2(x_i) = f_i$; $L_2(x_{i+1}) = f_{i+1}$, $L_2(x_{i+2}) = f_{i+2}$.

Полученный многочлен соответствует *параболической* (*квадратичной интерполяции*), так как графиком функции является парабола.

Б. ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ НЬЮТОНА

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МНОГОЧЛЕН НЬЮТОНА ДЛЯ НЕРАВНОМЕРНОЙ СЕТКИ

Пусть исходная (интерполируемая) сеточная функция $y_i = f\left(x_i\right) = f_i$, $i = \overline{0, n}$, задана на неравномерной сетке $\Omega_n \equiv \{x_0, x_1, x_2, ..., x_n\}$, характеризующейся шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = \text{var}$.

Выбрав внутри неравномерной сетки соответствующие шаблоны интерполяции $(x_i, x_{i+1}), (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}), ..., (x_i, x_{i+1}, .., x_{i+k})$, введем следующие определения *разделенных разностей*:

– *разделенная разность нулевого порядка*: $f(x_i) = f_i$;

– *разделенная разность первого порядка*: $f(x_i, x_{i+1}) = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$;

– *разделенная разность второго порядка*: $f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \dfrac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}$;

– *разделенная разность k-го порядка*:

$$f(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}, ..., x_{i+k}) - f(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i};$$

– *разделенная разность n-го порядка в узле* x_0:

$$f(x_0, x_1, ..., x_n) = \frac{f(x_1, x_2, ..., x_n) - f(x_0, x_1, ..., x_{n-1})}{x_n - x_0}.$$

Интерполяционный многочлен Ньютона n-й степени имеет вид

$$N_n(x) = f_0 + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + ... +$$

$$+ f(x_0, x_1, ..., x_n)(x - x_0)(x - x_1) \cdot ... \cdot (x - x_{n-1}).$$

З а м е ч а н и я. Интерполяционный многочлен Ньютона (так же, как и многочлен Ньютона, выражаемый ниже через конечные разности) записан не через значения функции, как это имеет место для многочлена Лагранжа, а через разделенные разности. Поэтому при изменении степени k в процессе интерполирования у многочлена Ньютона $N_k(x)$ требуется только добавить или отбросить соответствующее число слагаемых. Это иногда упрощает алгоритм интерполирования.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ НЬЮТОНА
ДЛЯ РАВНОМЕРНОЙ СЕТКИ

Пусть исходная (интерполируемая) сеточная функция $y_i = f(x_i) = f_i$, $i = \overline{0,n}$, задана на равномерной сетке $\Omega_n \equiv \{x_0, x_1, x_2, ..., x_n\}$, характеризующейся шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$.

Выбрав внутри равномерной сетки соответствующие шаблоны интерполяции $(x_i, x_{i+1}), (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}), ..., (x_i, x_{i+1}, .., x_{i+k})$, введем следующие определения *конечных разностей*:

– *конечная разность нулевого порядка*: f_i;

– *конечная разность первого порядка*: $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$;

– *конечная разность второго порядка*: $\Delta^2 f_i = \Delta(\Delta f_i) = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i$;

– *конечная разность* k*-го порядка*: $\Delta^k f_i = \Delta(\Delta^{k-1} f_i) = \sum\limits_{j=0}^{k} (-1)^j C_k^j f_{i+j}$,

где $C_k^j = \dfrac{k!}{(k-j)!\,j!}$;

– *конечная разность* n*-го порядка в узле* x_0: $\Delta^n f_0 = \Delta^{n-1} f_1 - \Delta^{n-1} f_0$.

Интерполяционный многочлен Ньютона n*-го порядка* имеет вид

$$N_n^{(I)}(q) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{1!} q + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} q(q-1) + \ldots + \frac{\Delta^n f_0}{n!} q(q-1)\ldots(q-n+1),$$

где $q = \dfrac{x - x_0}{h}$ – *фаза интерполяции относительно точки* x_0.

В. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ СПЛАЙНАМИ

Сплайн-функцией, или *сплайном,* называется совокупность $S_{m,i}(x)$– алгебраических многочленов степени m (звеньев), т.е.

$$S_{m,i}(x) = \sum_{k=0}^{m} a_{k,i}(x - x_i)^k ,$$

где $a_{k,i}$, $k = \overline{0,m}$ – коэффициенты, определенных на частичных отрезках $[x_i, x_{i+1}]$, $i = \overline{0, n-1}$, и соединенных вместе по всем частичным отрезкам так, чтобы можно было составить многозвенную функцию $S_m(x) = \bigcup\limits_{i=0}^{n-1} S_{m,i}(x)$, определенную и непрерывную на всем отрезке $[a,b]$ вместе со всеми своими производными $S_m^{(p)}(x)$ до некоторого их порядка $p = 1,2,\ldots$.

Разность между m и наибольшим порядком производной, непрерывной на отрезке $[a,b]$, определяет *дефект сплайна* q.

Рассмотрим задачу восполнения заданной сеточной функции $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, $x_i \in [a, b]$ на базе интерполяционных глобальных *кубических дифференциальных сплайнов дефекта один* ($m = 3$, $q = 1$), т.е. $S_3(x) \in C_2[a, b]$. При этом предположим, что восполняемая функция достаточно гладкая.

Уравнение i -го звена сплайна ($i = 0,1,...,n-1$) ищется в виде

$$S_{3,i}(x) = a_{0,i} + a_{1,i}(x - x_i) + a_{2,i}(x - x_i)^2 + a_{3,i}(x - x_i)^3, \quad x \in [x_i, x_{i+1}],$$

где $a_{0,i}, a_{1,i}, a_{2,i}, a_{3,i}$ - неизвестные коэффициенты. Они вычисляются на основе применения условий непрерывности (гладкости) сплайна $S_3(x)$, которые называются *условиями стыковки и согласования*:

1) условие интерполяции $S_3(x_i) = f_i$, $i = \overline{0, n}$;

2) условие непрерывности во внутренних узлах сетки:

$$S_3(x_i - 0) = S_3(x_i + 0), \quad i = \overline{1, n-1} \;;$$

3) условие непрерывности первой производной во внутренних узлах сетки:

$$S_3'(x_i - 0) = S_3'(x_i + 0), \quad i = \overline{1, n-1} \;;$$

4) условие непрерывности второй производной во внутренних узлах сетки:

$$S_3''(x_i - 0) = S_3''(x_i + 0), \quad i = \overline{1, n-1} \;;$$

5) условие для определения второй производной в узлах x_0, x_n:

$$S_3''(x_0) = 0, \qquad S_3''(x_n) = 0\,.$$

Заметим, что имеется n частичных отрезков $[x_i, x_{i+1}]$ и, следовательно, $4n$ неизвестных коэффициентов сплайна, для нахождения которых имеется $(n+1) + 3(n-1) + 2 = 4n$ условий.

Можно показать, что уравнение звена сплайна удобно записать в форме

$$S_{3,i}(x) = f_i + \left(\frac{1}{h_{i+1}} \Delta f_i - \frac{h_{i+1}}{2} m_i - \frac{h_{i+1}}{6} \Delta m_i \right) \cdot (x - x_i) +$$

$$+ \frac{m_i}{2} \cdot (x - x_i)^2 + \frac{1}{6h_{i+1}} \Delta m_i \cdot (x - x_i)^3, \quad i = \overline{0, n-1},$$

где $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$, $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$, $\Delta m_i = m_{i+1} - m_i$, а параметры m_i во внутренних узлах сетки находятся из системы трехдиагонального вида:

$$\frac{h_i}{6} m_{i-1} + \frac{h_i + h_{i+1}}{3} m_i + \frac{h_{i+1}}{6} m_{i+1} = \frac{\Delta f_i}{h_{i+1}} - \frac{\Delta f_{i-1}}{h_i}, \quad i = \overline{1, n-1}.$$

Из условия 5 согласования и стыковки следуют два так называемых краевых условия: $m_0 = 0$; $m_n = 0$. Такие краевые условия называются условиями *натурального сплайна*. Решая систему, можно найти параметры m_i, $i = \overline{0, n}$ и получить уравнения всех звеньев сплайна.

Лекция **14 (продолжение лекции 13)**

МЕТОДЫ ИНТЕГРАЛЬНОГО СГЛАЖИВАНИЯ

А. ТОЧЕЧНЫЙ МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ МНОГОЧЛЕНОВ

Пусть на множестве $\Omega = [a, b]$ задана сетка $\Omega_n = \left\{ x_i,\, i = \overline{0, n} \right\}$, определяемая $n+1$ точкой $x_0, x_1, \ldots, x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i),\ i = \overline{0, n}$:

$$y_0 = f(x_0),\ y_1 = f(x_1), \ldots,\ y_n = f(x_n).$$

Как и ранее, будем использовать обозначение $f_i = f(x_i)$.

На практике сглаживающую функцию удобно представить в виде *обобщенного многочлена*

$$f_m(x, \overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j\ \varphi_j(x) = a_0\, \varphi_0(x) + a_1\, \varphi_1(x) + \ldots + a_m\, \varphi_m(x),$$

где $\overline{a} = \{a_0, a_1, \ldots, a_m\}^T$ – вектор неизвестных коэффициентов, $\{\varphi_j\} = \{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m\}$ – заданная *система базисных функций*, степень многочлена удовлетворяет условию $0 \le m \le n$. В качестве базисных функций могут выбираться, например, степенные функции $\{\varphi_j\} = \{x^j\}$, многочлены Чебышева, тригонометрические функции $\{\varphi_j\} = \{\cos jx\}$. Требуется найти такие коэффициенты многочлена $a_0, a_1, \ldots, a_m$, обеспечивающие минимум среднеквадратичной погрешности:

$$\delta_m(\overline{a}) = \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} \left[f_m(x_i, \overline{a}) - f_i \right]^2} \to \min_{a_0, a_1, \ldots a_m}.$$

т.е. такой вектор $\overline{a} = \{a_0, a_1, \ldots, a_m\}^T$, который обеспечивает минимум величины $\delta_m(\overline{a})$.

В соответствии с постановкой задачи найдем коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$ многочлена, обеспечивающие минимум критерия.

Очевидно, минимум критерия достигается, если

$$\Delta = \sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\, a_0 + \varphi_1(x_i)\, a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\, a_m - f_i \right]^2 \to \min_{a_0, a_1, \ldots a_m}.$$

Так как на коэффициенты не наложено никаких ограничений, применим необходимые условия безусловного экстремума:

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_j} = 0, \qquad j = 0, 1, \ldots, m.$$

В результате получаем систему

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_0} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\, a_0 + \varphi_1(x_i)\, a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\, a_m - f_i \right] \cdot \varphi_0(x_i) = 0\,,$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_1} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\, a_0 + \varphi_1(x_i)\, a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\, a_m - f_i \right] \cdot \varphi_1(x_i) = 0\,,$$

....

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_m} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\, a_0 + \varphi_1(x_i)\, a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\, a_m - f_i \right] \cdot \varphi_m(x_i) = 0\,.$$

Для компактной записи полученного результата удобно использовать скалярное произведение.

Скалярным произведением функций $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ на множестве точек $\left\{x_i,\ i = \overline{0,n}\right\}$ называется сумма произведений значений функций, вычисленных во всех точках, т.е.

$$(\varphi_k, \varphi_l) = \sum_{i=0}^{n} \varphi_k(x_i)\ \varphi_l(x_i)\,.$$

Число $\|\varphi_k\| = \sqrt{(\varphi_k, \varphi_k)}$ называется *нормой* функции $\varphi_k(x)$ на множестве точек $\left\{x_i,\ i = \overline{0,n}\right\}$.

Тогда полученную систему можно переписать в форме:

$$(\varphi_0, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)\, a_1 + \ldots + (\varphi_0, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_0)\,,$$

$$(\varphi_1, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)\, a_1 + \ldots + (\varphi_1, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_1)\,,$$

....

$$(\varphi_m, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_m, \varphi_1)\, a_1 + \ldots + (\varphi_m, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_m)\,,$$

где $(f, \varphi_k) = \sum\limits_{i=0}^{n} f_i\ \varphi_k(x_i)$. Таким образом, получена система $(m+1)$ линейных уравнений с $(m+1)$ неизвестными $a_0, a_1, \ldots, a_m$. В силу равенства $(\varphi_k, \varphi_l) = (\varphi_l, \varphi_k)$ матрица

$$A = \begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) \ \ldots\ldots\ldots & (\varphi_0, \varphi_m) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) \ \ldots\ldots\ldots & (\varphi_1, \varphi_m) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots \\ (\varphi_m, \varphi_0) & (\varphi_m, \varphi_1) \ \ldots\ldots\ldots & (\varphi_m, \varphi_m) \end{pmatrix}$$

системы является симметрической. Если базисные функции $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m$ линейно независимы, определитель матрицы A не равен нулю (он называется определителем Грама). Тогда решение системы существует и единственно. Аналогичный вывод можно сделать и о задаче определения многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения.

Метод решения поставленной задачи называется *методом наименьших квадратов* или *методом наилучшего среднеквадратичного приближения*, поскольку величина критерия представляет собой сумму квадратов отклонений значений аппроксимирующей функции $f_m(x, \overline{a})$ от заданных значений f_i на множестве точек $\left\{x_i,\ i = \overline{0,n}\right\}$. Согласно приведенной классификации метод является сглаживающим.

В качестве базисных функций используем степенные: $\varphi_j(x) = x^j,\ j = \overline{0,m}$. В этом случае обобщенный многочлен имеет вид

$$f_m(x,\overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m .$$

Тогда $(f, \varphi_j) = \sum_{i=0}^{n} f_i x_i^j$, $(\varphi_k, \varphi_l) = \sum_{i=0}^{n} x_i^{k+l}$, $(\varphi_k, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{n} x_i^{2k}$ и система для нахождения коэффициентов имеет вид

$$\left(\sum_{i=0}^{n} 1\right) a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right) a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right) a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right) a_m = \sum_{i=0}^{n} f_i ,$$

$$\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right) a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right) a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^3\right) a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right) a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i f_i ,$$

....

$$\left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right) a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right) a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2}\right) a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{2m}\right) a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i^m f_i .$$

Обозначим

$$s_0 = n + 1, \quad t_0 = f_0 + f_1 + \ldots + f_n ,$$

$$s_k = x_0^k + x_1^k + \ldots + x_n^k ,\ \ k = 1,\ldots,2m ;$$

$$t_k = x_0^k f_0 + x_1^k f_1 + \ldots + x_n^k f_n ,\ \ k = 1,\ldots,m .$$

Тогда система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 + \ldots + s_m a_m &= t_0 , \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 + \ldots + s_{m+1} a_m &= t_1 , \\ &\vdots \\ s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \ldots + s_{2m} a_m &= t_m . \end{aligned} \tag{5.5}$$

Решая систему линейных алгебраических уравнений, находим неизвестные коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Подставляя решение в $f_m(x,\overline{a})$, получаем искомую формулу, которая сглаживает экспериментальные данные.

Методика решения задачи сглаживания

Шаг 1. Вычислить коэффициенты $s_k, k = \overline{0,2m};\ t_k, k = \overline{0,m}$, по заданной сеточной функции и записать систему (5.5).

Шаг 2. Решить полученную систему одним из методов решения СЛАУ и найти коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Шаг 3. Записать искомую сглаживающую функцию

$$f_m(x,\overline{a}) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m .$$

З а м е ч а н и я. Если для сеточной функции, заданной в $(n+1)$-й точке $x_0, x_1, ..., x_n$, определять многочлен степени $m = n$ методом наименьших квадратов, то тогда $f_m(x, \overline{a})$ совпадает с интерполяционным многочленом и метод становится эквивалентным методу интерполяции. При этом $\Delta = 0$ и $\delta_m(\overline{a}) = 0$.

Б. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ МНОГОЧЛЕНОВ

Пусть на отрезке $[a,b]$ задана интегрируемая с квадратом функция $y = f(x)$ ($\int_a^b f^2(x)dx < \infty$), которая по каким-либо причинам трудна для использования (например, трудно вычислить производные). Тогда может быть поставлена задача ее приближенной замены (аппроксимации) более простой функцией $y = F(x, \overline{a})$. Вектор неизвестных параметров $\overline{a}$ ищется из условия минимального расстояния $d(f, F)$ между функциями $y = f(x)$ и $y = F(x, \overline{a})$:

$$d(f,F) = \sqrt{\int_a^b [F(x,\overline{a}) - f(x)]^2 \, dx} \to \min_{\overline{a}} .$$

Эта задача называется задачей *наилучшего интегрального среднеквадратичного приближения* (*аппроксимации*) *на отрезке* $[a,b]$. Она эквивалентна проблеме нахождения функции $y = F(x, \overline{a})$ из *интегрального условия*:

$$\Delta = \int_a^b [F(x,\overline{a}) - f(x)]^2 \, dx \to \min_{\overline{a}} ,$$

где Δ – *погрешность аппроксимации*. Искомая функция $y = F(x, \overline{a})$ называется *аппроксимирующей функцией*, а метод аппроксимации – *интегральным методом наименьших квадратов*. При решении этой задачи минимизируется заштрихованная площадь на рис.1, *в*.

На практике аппроксимирующую функцию удобно искать в виде *обобщенного многочлена*

$$F(x,\overline{a}) = f_m(x,\overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j \, \varphi_j(x) = a_0 \, \varphi_0(x) + a_1 \, \varphi_1(x) + ... + a_m \, \varphi_m(x) ,$$

где $\overline{a} = \{a_0, a_1, ..., a_m\}^T$ – вектор неизвестных коэффициентов, $\{\varphi_j\} = \{\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_m\}$ – заданная *система базисных функций*, степень многочлена удовлетворяет условию $0 \le m \le n$. В качестве базисных функций могут выбираться, например, степенные функции $\{\varphi_j\} = \{x^j\}$, ортогональные многочлены и др. Функции, входящие в систему, должны быть линейно независимыми.

Требуется найти такие коэффициенты многочлена $a_0, a_1, ..., a_m$, обеспечивающие минимум погрешности аппроксимации:

$$\Delta = \int_a^b \, [f_m(x,\overline{a}) - f(x)]^2 \, dx \to \min_{a_0, a_1, ... a_m} .$$

т.е. такой вектор $\overline{a} = \{a_0, a_1, ..., a_m\}^T$, который обеспечивает минимум величины Δ.

В соответствии с постановкой задачи найдем коэффициенты $a_0, a_1, ..., a_m$ обобщенного многочлена, обеспечивающие минимум критерия:

$$\Delta = \int_a^b [\, \varphi_0(x) a_0 + \varphi_1(x) a_1 + ... + \varphi_m(x) a_m - f(x)]^2 dx \to \min_{a_0, a_1, ... a_m} .$$

Так как на коэффициенты не наложено никаких ограничений, применим необходимые условия безусловного экстремума:

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_j} = 0, \quad j = 0,1, ..., m .$$

В результате получаем систему

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_0} = 2\int_a^b [\, \varphi_0(x) a_0 + \varphi_1(x) a_1 + ... + \varphi_m(x) a_m - f(x)] \cdot \varphi_0(x) dx = 0 ,$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_1} = 2\int_a^b [\varphi_0(x) a_0 + \varphi_1(x) a_1 + ... + \varphi_m(x) a_m - f(x)] \cdot \varphi_1(x) dx = 0 ,$$

....

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_m} = 2\int_a^b [\, \varphi_0(x) a_0 + \varphi_1(x) a_1 + ... + \varphi_m(x) a_m - f(x)] \cdot \varphi_m(x) dx = 0 .$$

Для компактной записи полученного результата удобно использовать скалярное произведение.

Скалярным произведением функций $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ на отрезке $[a,b]$ называется интеграл от их произведения на этом отрезке

$$(\varphi_k, \varphi_l) = \int_a^b \varphi_k(x)\, \varphi_l(x) dx .$$

Число $\|\varphi_k\| = \sqrt{(\varphi_k, \varphi_k)} = \sqrt{\int_a^b \varphi_k^2(x) dx}$ является *нормой функции* $\varphi_k(x)$ на отрезке $[a,b]$.

Тогда полученную систему можно переписать в форме:

$$(\varphi_0, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)\, a_1 + ... + (\varphi_0, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_0) ,$$

$$(\varphi_1, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)\, a_1 + ... + (\varphi_1, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_1) ,$$

....

$$(\varphi_m, \varphi_0)\, a_0 + (\varphi_m, \varphi_1)\, a_1 + ... + (\varphi_m, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_m) ,$$

где $(f,\varphi_k)=\int_a^b f(x)\,\varphi_k(x)\,dx$. Таким образом, получена система $(m+1)$ линейных уравнений с $(m+1)$ неизвестными $a_0, a_1, ..., a_m$. В силу равенства $(\varphi_k,\varphi_l)=(\varphi_l,\varphi_k)$ матрица

$$A=\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \ldots\ldots\ldots & (\varphi_0,\varphi_m) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \ldots\ldots\ldots & (\varphi_1,\varphi_m) \\ \ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots \\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) & \ldots\ldots\ldots & (\varphi_m,\varphi_m) \end{pmatrix}$$

системы является симметрической. Если базисные функции $\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_m$ линейно независимы, то определитель матрицы *A* не равен нулю (он называется определителем Грама). Тогда решение системы существует и единственно. Аналогичный вывод можно сделать и о задаче определения обобщенного многочлена.

ПРИМЕНЕНИЕ СТЕПЕННЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

В качестве базисных функций используем степенные: $\varphi_j(x)=x^j$, $j=\overline{0,m}$. В этом случае обобщенный многочлен имеет вид

$$f_m(x,\overline{a})=\sum_{j=0}^{m} a_j x^j = a_0 + a_1 x + ... + a_m x^m .$$

Тогда $(f,\varphi_j)=\int_a^b f(x)\;x^j dx$, $(\varphi_k,\varphi_l)=\int_a^b x^{k+l}dx$, $(\varphi_k,\varphi_k)=\int_a^b x^{2k}dx$ и система имеет вид

$$\left(\int_a^b 1\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^2dx\right)a_2+...+\left(\int_a^b x^m dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\,dx,$$

$$\left(\int_a^b x\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x^2\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^3dx\right)a_2+...+\left(\int_a^b x^{m+1}dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\;x\,dx,$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$\left(\int_a^b x^m\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x^{m+1}\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^{m+2}dx\right)a_2+...+\left(\int_a^b x^{2m}dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\;x^m\,dx.$$

Обозначим

$$s_0=b-a, \qquad s_k=\int_a^b x^k\,dx,\ \ k=1,...,2m;$$

$$t_0=\int_a^b f(x)\,dx, \qquad t_k=\int_a^b f(x)\;x^k\,dx,\ \ k=1,...,m.$$

Тогда полученная система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 + \ldots + s_m a_m &= t_0\,, \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 + \ldots + s_{m+1} a_m &= t_1\,, \\ &\vdots \\ s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \ldots + s_{2m} a_m &= t_m\,. \end{aligned} \qquad (5.6)$$

Решая систему линейных алгебраических уравнений, находим неизвестные коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Методика решения задачи аппроксимации

Шаг 1. Вычислить коэффициенты $s_k, k = \overline{0,2m};\ t_k, k = \overline{0,m}$, по заданной функции и записать систему (5.6).

Шаг 2. Решить полученную систему одним из методов решения СЛАУ и найти коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Шаг 3. Записать искомую функцию $f_m(x, \overline{a}) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m$.

З а м е ч а н и я.

1. К недостаткам описанного метода относится необходимость вычисления определенных интегралов, которые могут быть весьма сложными. Для их нахождения часто используются методы численного интегрирования.

2. Реализация интегрального метода наименьших квадратов с использованием степенных функций связана с решением системы линейных алгебраических уравнений относительно неопределенных коэффициентов. Этот недостаток устраняется выбором ортогональных базисных функций $\varphi_j(x)$.

ПРИМЕНЕНИЕ ОРТОГОНАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

При нахождении коэффициентов обобщенного многочлена с помощью ортогональных базисных функций нет необходимости решать систему (5.6).

Функции $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ называются *ортогональными* на отрезке $[a,b]$, если их скалярное произведение равно нулю: $(\varphi_k, \varphi_l) = \int\limits_a^b \varphi_k(x) \cdot \varphi_l(x)\, dx = 0, \quad k \neq l$.

Система функций $\{\varphi_j(x)\}$, $j = 0, 1, \ldots, m$, *называется ортогональной* на отрезке $[a,b]$, если все функции этой системы попарно ортогональны на этом отрезке. При этом $(\varphi_k, \varphi_k) = \int\limits_a^b \varphi_k(x) \cdot \varphi_k(x)\, dx \neq 0$.

Так, если в обобщенном многочлене

$$f_m(x, \overline{a}) = Q_m(x) = a_0\, \varphi_0(x) + a_1\, \varphi_1(x) + \ldots + a_m\, \varphi_m(x)$$

система базисных функций ортогональная, то система (5.6) перепишется в виде

$$(\varphi_0,\varphi_0)\,a_0 = (f,\varphi_0)\,,$$
$$(\varphi_1,\varphi_1)\,a_1 = (f,\varphi_1)\,,$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$
$$(\varphi_m,\varphi_m)\,a_m = (f,\varphi_m)\,,$$

т.е. все недиагональные элементы в матрице системы становятся равными нулю. Следовательно, коэффициенты обобщенного многочлена находятся по формуле

$$a_j = \frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)} = \frac{(f,\varphi_j)}{\left\|\varphi_j\right\|^2} = \frac{\int\limits_a^b f(x)\cdot\varphi_j(x)\,dx}{\int\limits_a^b \varphi_j^2(x)\,dx}, \quad j = 0,1,\dots,m\,.$$

Коэффициенты обобщенного многочлена называются *коэффициентами Фурье* функции $y = f(x)$ относительно ортогональной на отрезке $[a,b]$ системы функций.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ ФОРМУЛ

Подбирается одна из двухпараметрических формул:

$$f(x,a_0,a_1) = a_0 + \frac{a_1}{x}; \quad f(x,a_0,a_1) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}; \quad f(x,a_0,a_1) = \frac{x}{a_0 + a_1 x};$$

$$f(x,a_0,a_1) = a_0\,a_1^x; \quad f(x,a_0,a_1) = a_0\,e^{a_1 x}; \quad f(x,a_0,a_1) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}};$$

$$f(x,a_0,a_1) = a_0 + a_1 \ln x; \quad f(x,a_0,a_1) = \frac{a_0}{a_1 + x}\,, \quad f(x,a_0,a_1) = \frac{a_0 x}{a_1 + x}, \dots,$$

где a_0, a_1 – неизвестные коэффициенты.

Требуется найти коэффициенты a_0, a_1, обеспечивающие минимум погрешности аппроксимации на основе метода наименьших квадратов:

$$\Delta = \int\limits_a^b \left[f(x,a_0,a_1) - f(x)\right]^2 dx \to \min_{a_0,a_1}.$$

Для нахождения коэффициентов a_0, a_1 применяются необходимые условия экстремума: $\dfrac{\partial\Delta}{\partial a_0} = 0,\quad \dfrac{\partial\Delta}{\partial a_1} = 0$. В отличие от применения степенных функций, нахождение неизвестных коэффициентов сводится к решению двух нелинейных уравнений.

Лекция 15

6. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть на множестве $\Omega = [a, b]$ заданы:

а) сетка $\Omega_n = \left\{x_i, i = \overline{0, n}\right\}$, определяемая $n+1$ точкой $x_0, x_1, ..., x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$:

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), ..., y_n = f(x_n),$$

где $x_i \in [a, b] = [x_0, x_n]$ - в общем случае неравноотстоящие узлы (неравномерная сетка), определяемые шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \text{var}$), $i = \overline{0, n-1}$. При $h_{i+1} = h = \text{const}$ узлы являются равноотстоящими (равномерная сетка). Как и ранее будем использовать обозначение $f_i = f(x_i)$;

б) точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;

в) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно h.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных $\hat{f}^{(p)}(x)\Big|_{x=x_j}$ в точках x_j сетки, где p – порядок производной.

Иначе требуется получить аппроксимационный оператор $\hat{f}^{(p)}(x_j)$, удовлетворяющий условию $\left|f^{(p)}(x_j) - \hat{f}^{(p)}(x_j)\right| \le C\, h^t$, где $C = \text{const}$, не зависящая от величины шага h.

Заметим, что символом «^» здесь и далее обозначаются операторы дифференцирования.

З а м е ч а н и я.

1. Если задана точка $x^* \in [a, b]$, не совпадающая ни с одним из узлов сетки, то решается либо задача интерполяции заданной сеточной функции, либо задача сглаживания методом наименьших квадратов. Полученная функция дифференцируется необходимое число раз и затем вычисляется значение производной в точке x^*.

2. Процедура численного дифференцирования является некорректной, поскольку погрешность округления, возникающая при вычислении разностных отношений, как правило, намного превосходит погрешность в задании значений функции и может даже неограниченно возрастать при стремлении шага сетки к нулю, однако методы численного дифференцирования широко применяются на практике.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

А. ПРИМЕНЕНИЕ ДВУХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Выберем *двухточечный шаблон* $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$ на неравномерной сетке Ω_n.

Формулы для вычисления первой производной имеют вид:

- *в левой точке шаблона*

$$\hat{f}'_{i,v} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} \qquad \left(\frac{h_{i+1}}{2} M_{2,i}\right);$$

- *в правой точке шаблона*

$$\hat{f}'_{i+1,v} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} \qquad \left(\frac{h_{i+1}}{2} M_{2,i}\right),$$

где $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$, $M_{2,i} = \max\limits_{x \in Ш_{2,i}} \left| f''(x) \right|$.

З а м е ч а н и я.

1. С помощью разложения функций по формуле Тейлора можно показать, что $f'_i = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \dfrac{h_{i+1}}{2} f''(\xi)$, где $\xi \in (x_i, x_{i+1})$. Так как справедлива оценка $\left| -\dfrac{h_{i+1}}{2} f''(\xi) \right| \le \dfrac{h_{i+1}}{2} \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]} \left| f''(x) \right| = \dfrac{h_{i+1} \cdot M_{2,i}}{2}$, то отсюда следует формула в левой точке шаблона. В скобках справа от аппроксимационных операторов здесь и далее указываются правые части оценок их погрешностей.

2. Формулы справедливы и для равномерной, и для неравномерной сеток. Они аппроксимируют производную с первым порядком аппроксимации.

2. Нижние индексы v и c, относящиеся к аппроксимационным операторам, указывают на тип шаблона – *нерегулярный* ($h_{i+1} = \mathrm{var}$), характеризующий неравномерную сетку, и *регулярный* ($h_{i+1} = \mathrm{const}$)), характеризующий равномерную сетку.

4. Далее в тексте оценочная константа $M_{p,i} = \max\limits_{x \in Ш_{p,i}} \left| f^{(p)}(x) \right|$ для краткости будет, как правило, использоваться без дополнительного ее описания. В нижнем индексе этой константы всюду указывается p – порядок производной.

Б. ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *трехточечный* (двухшаговый) *шаблон* $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, характеризующийся шагом $h = \mathrm{const}$.

Формулы для подсчета первой производной:

- *в левой крайней точке*

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{3} M_{3,i}\right);$$

- в центральной точке

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i+1} - f_{i-1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{6}M_{3,i}\right);$$

- в правой крайней точке

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{3}M_{3,i}\right),$$

где $M_{3,i} = \max\limits_{x \in Ш_{3,i}} \left|f'''(x)\right|$.

Формула для подсчета второй производной имеет вид:

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right).$$

Пример 1. Дана сеточная функция (табл. 1), являющаяся сеточным представлением формульной функции $y(x) = \dfrac{1}{x}$.

Таблица 1

i	0	1	2	3	4	5
x_i	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
f_i	1,000000	0,83333333	0,7142857	0,6250000	0,5555555	0,500000

Заданы также порядок $t = 2$ относительно шага h, который необходимо обеспечить при решении задачи, и точка $x_j = 1{,}4$.

Требуется вычислить значение первой производной $f'(1{,}4)$ и второй производной $f''(1{,}4)$ с помощью различных шаблонов и соответствующих формул.

☐ Воспользуемся вышеприведенной методикой.

1. Так как шаг задания сеточной функции постоянный $h = x_{i+1} - x_i = 0{,}2$, точка $x_j = 1{,}4$ находится внутри сетки Ω_n, то для вычисления производной в этой точке выбирается формула, имеющая второй порядок аппроксимации относительно шага h. При этом центральная точка шаблона совпадает с точкой $x_j = 1{,}4$.

2. Выберем трехточечный шаблон $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}2;\, 1{,}4;\, 1{,}6)$, в котором $x_i = 1{,}4$ ($i = 2$); $x_{i-1} = 1{,}2$ ($i - 1 = 1$); $x_{i+1} = 1{,}6$ ($i + 1 = 3$). В данном шаблоне центральная точка $x_i = 1{,}4$, что соответствует центральному типу аппроксимационной формулы.

3. Подсчитаем искомое значение производной по формуле:

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{0{,}6250000 - 0{,}8333333}{2 \cdot 0{,}2}.$$

Для вычисления первой производной можно было использовать и другие формулы. При выборе шаблона $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}4;\, 1{,}6;\, 1{,}8)$ имеем

$$f'(1{,}4) = \hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) = \frac{1}{2h}\left[-3f(1{,}4) + 4f(1{,}6) - f(1{,}8)\right] =$$

$$= \frac{1}{2\cdot 0{,}2}\left[-3\cdot 0{,}7142857 + 4\cdot 0{,}625 - 0{,}5555\right] = -0{,}496017.$$

Фактическая абсолютная погрешность составляет $\left|-0{,}496017 - 0{,}510204\right| \cong 0{,}0142$, относительная погрешность равна 2,78%.

Если выбрать шаблон $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1;\,1{,}2;\,1{,}4)$, то получаем

$$f'(1{,}4) \cong \hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1}\right) = \frac{1}{2\cdot 0{,}2}\left[f(1) - 4f(1{,}2) + 3f(1{,}4)\right] =$$

$$= \frac{1}{0{,}4}\left[1{,}0 - 4\cdot 0{,}83333 + 3\cdot 0{,}7142857\right] = -0{,}476187.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $\left|-0{,}476187 - 0{,}510204\right| \cong 0{,}03401$, относительная погрешность составляет 6,66%.

Для вычисления второй производной можно взять формулу на шаблоне $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}2;\,1{,}4;\,1{,}6)$:

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) = \frac{1}{0{,}2^2}\left[f(1{,}2) - 2\cdot f(1{,}4) + f(1{,}6)\right] =$$

$$= \frac{1}{0{,}04}\left[0{,}8333 - 2\cdot 0{,}7142857 + 0{,}625\right] = 0{,}743965.$$

Точное значение $f''(1{,}4) = \dfrac{2}{1{,}4^3} = 0{,}7288629$. Фактическая абсолютная погрешность равна 0,0151, относительная погрешность 2,07%. ■

В. ПРИМЕНЕНИЕ ЧЕТЫРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *четырехточечный* (трехшаговый) *шаблон* $Ш_{4,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right)$ с шагом h.

Формулы для вычисления первой производной с третьим порядком аппроксимации имеют вид:

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}\left(-11f_{i-2} + 18f_{i-1} - 9f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}\left(-2f_{i-2} - 3f_{i-1} + 6f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{6h}\left(f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{6h}\left(-2f_{i-2} + 9f_{i-1} - 18f_i + 11f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right).$$

Формулы для вычисления вторых производных со вторым порядком аппроксимации имеют вид:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{h^2}\left(2f_{i-2} - 5f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{11h^2}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{h^2}\left(-f_{i-2} + 4f_{i-1} - 5f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{11h^2}{12}M_{4,i}\right).$$

Г. ПРИМЕНЕНИЕ ПЯТИТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *пятиточечный* (четырехшаговый) *шаблон* $Ш_{5,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}\right)$ с шагом h.

Формулы для вычисления первых производных с четвертым порядком имеют вид:

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{12h}\left(-25f_{i-2} + 48f_{i-1} - 36f_i + 16f_{i+1} - 3f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{5}M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{12h}\left(-3f_{i-2} - 10f_{i-1} + 18f_i - 6f_{i+1} + f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{20}M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{12h}\left(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{30}M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{12h}\left(-f_{i-2} + 6f_{i-1} - 18f_i + 10f_{i+1} + 3f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{20}M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+2,c} = \frac{1}{12h}\left(3f_{i-2} - 16f_{i-1} + 36f_i - 48f_{i+1} + 25f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{5}M_{5,i}\right).$$

Формулы для вычисления вторых производных с третьим порядком имеют вид:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{12h^2}\left(35f_{i-2} - 104f_{i-1} + 114f_i - 56f_{i+1} + 11f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{12h^2}\left(11f_{i-2} - 20f_{i-1} + 6f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{12h^2}\left(-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{12h^2}\left(-f_{i-2} + 4f_{i-1} + 6f_i - 20f_{i+1} + 11f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+2,c} = \frac{1}{12h^2}\left(11f_{i-2} - 56f_{i-1} + 114f_i - 104f_{i+1} + 35f_{i+2}\right).$$

Формулы для вычисления третьих производных в точке x_i имеют вид:

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{h^3}\left(-f_{i-2} + 3f_{i-1} - 3f_i + f_{i+1}\right),$$

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{h^3}\left(-f_{i-1} + 3f_i - 3f_{i+1} + f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{2h^3}\left(-f_{i-2} + 2f_{i-1} - 2f_{i+1} + f_{i+2}\right).$$

Первые две формулы аппроксимируют третьи производные с первым порядком, а третья – со вторым.

7. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a,b]$ и известна ее первообразная $F(x)$, то определенный интеграл от этой функции может быть вычислен по формуле Ньютона–Лейбница

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a),$$

где $F'(x) = f(x)$.

Однако во многих случаях возникают большие трудности, связанные с нахождением первообразной, или эта задача не может быть решена элементарными способами. Например, в элементарных функциях не выражается интеграл $\int_1^2 \frac{dx}{\ln x}$.

Кроме того, в вычислительной практике часто требуется находить значения определенных интегралов от сеточных функций, заданных в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, ..., x_n\}, x_{i+1} = x_i + h_{i+1}, \quad i = \overline{0, n-1},\ h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$.

В связи с этим в численном анализе имеется специальный математический аппарат численного интегрирования, отличный от соответствующего аппарата математического анализа.

Пусть на отрезке $[a,b]$ на равномерной сетке Ω_n ($h_{i+1} = h = \text{const}$) или на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, ..., x_n\}$ ($h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = \text{var}$) заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i), i = \overline{0,n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$ или сеточное представление формульной функции $y = f(x)$;

б) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно величины шага h.

Требуется с заданным порядком точности вычислить значение интеграла

$$\hat{I}_a^b \cong I_a^b = \int_a^b f(x)\,dx\,.$$

Иначе требуется получить аппроксимационный оператор интегрирования $\hat{I}_a^b$, удовлетворяющий условию $\left|\hat{I}_a^b - I_a^b\right| \le C\,h^t$, где $C = \mathrm{const}$, не зависящая от h.

Отметим, что символом «^» здесь и далее обозначаются операторы интегрирования.

Одним из классических методов вычисления определенных интегралов является применение *функциональных квадратурных формул*

$$I_a^b = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{j=1}^{N} q_j f(x_j) \equiv \hat{I}_a^b,$$

где q_j – *весовые коэффициенты*; $x_j, j = \overline{1,N}$,– некоторые точки отрезка $[a,b]$; N – число точек (*узлов квадратурной формулы*).

Квадратурная формула называется *точной* для многочленов степени m, если при замене функции $f(x)$ на произвольный алгебраический многочлен степени не выше m приближенное равенство становится точным. В этом случае говорят, что квадратурная формула обладает *m-свойством*.

При приближенном вычислении интеграла, как правило, отрезок $[a,b]$ представляется в виде объединения l непересекающихся частичных отрезков вида $[x_{i-r}, x_{i+s}]$, которым соответствует шаблон $Ш_{k,i} = \left(x_{i-r}, \ldots, x_i, ..., x_{i+s}\right)$, где i – номер базового узла сетки; r и s – количество узлов левее и правее узла с номером i; $k = r + s + 1$ – общее число узлов (точек) в шаблоне (рис. 1). На каждом частичном отрезке с номером $j = 1,\ldots,l$ вычисляется интеграл по соответствующей квадратурной формуле

$$I_{i-r}^{i+s,j} = \int_{x_{i-r}}^{x_{i+s}} f(x)dx \cong \hat{I}_{i-r}^{i+s,j} \equiv \hat{I}^j, \quad j = 1,\ldots,l,$$

а затем полученные значения суммируются по всем частичным отрезкам, т.е.

$$\hat{I}_a^b = \sum_{j=0}^{l} \hat{I}^j = \sum_{j=0}^{l} \hat{I}_{i-r}^{i+s,j}\,.$$

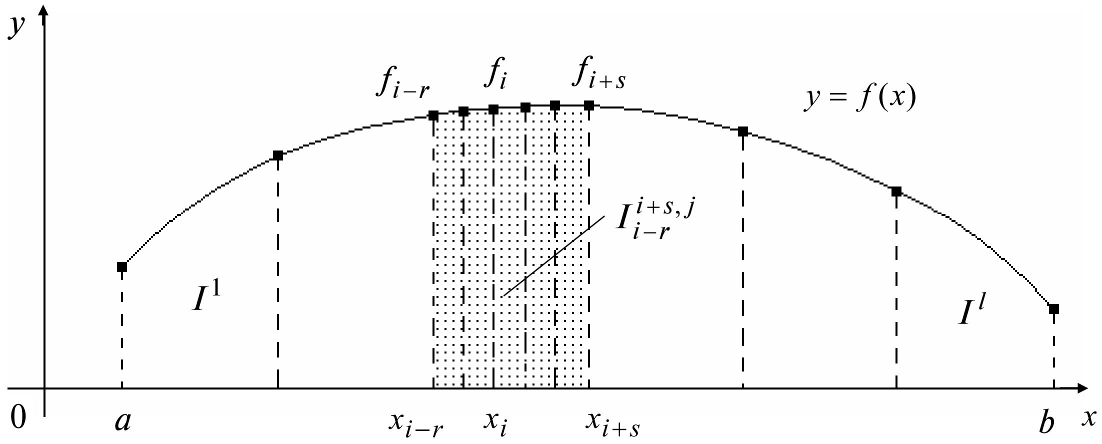


Рис. 1

Далее в силу использования описанного представления проблеме вычисления интеграла на частичном отрезке уделяется основное внимание. По заданной сеточной функции или сеточному представлению формульной функции на частичном отрезке строится интерполяционный многочлен некоторой степени. Значение $\hat{I}_{i-r}^{i+s}$ определяется величиной интеграла от этого многочлена.

Как следует из замечаний, для вычисления интеграла могут использоваться различные частичные отрезки и соответствующие им шаблоны.

А. ПРИМЕНЕНИЕ ДВУХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Пусть задана сеточная функция $f(x_i)$, $i = \overline{0,n}$, на регулярном шаблоне при $h = \text{const}$. На частичном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$, которому соответствует двухточечный шаблон $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$, где $r = 0$, $s = 1$, функция $f(x)$ заменяется тремя способами, порождающими соответствующие методы интегрирования. В каждом методе значение интеграла $I_i^{i+1} = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ аппроксимируется величиной $\hat{I}_i^{i+1}$, равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс и получаемой по *одноинтервальной формуле*. Нижние индексы соответствуют названию квадратурной формулы, рядом с формулами приводятся оценки порядка (точности) аппроксимации.

Подчеркнем, что данные формулы справедливы как для регулярного, так и для нерегулярного шаблона, хотя последующее их суммирование по всем частичным отрезкам $[x_i, x_{i+1}]$ традиционно выполняется при $h = \text{const}$.

Искомые интегралы определяются не на частичных отрезках, а на всем отрезке $[a,b]$, и поэтому путем суммирования левых и правых частей одноинтервальных формул получаются так называемые *составные квадратурные формулы*.

А1. Метод прямоугольников (немодифицированный). Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом нулевой степени $L_0(x) = f(x_i)$, построенным по значению функции $f_i = f(x_i)$ в левой точке частичного отрезка (рис. 2,*а*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс - площади прямоугольника. В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу второго порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{пр}}^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_0(x)\,dx = h_{i+1}\cdot f_i . \qquad O(h^2)$$

Составная квадратурная формула метода прямоугольников (немодифицированного) на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пр}}^{b} = h\left(f_0 + f_1 + \ldots + f_{n-1}\right) = h\sum_{i=0}^{n-1} f_i .$$

Формула метода прямоугольников (немодифицированного) является точной для многочленов нулевой степени и обладает первым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{пр}}^{b}\right| \le \frac{M_1}{2}\left(b-a\right)h ,$$

где $M_1 = \max\limits_{[a,b]} \left|f'(x)\right|$.

А2. Метод прямоугольников (модифицированный). Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом нулевой степени $L_0(x) = f\left(\dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$, построенным по значению функции $f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_{i+\frac{1}{2}})$ в середине частичного отрезка $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$ (рис. 2,*б*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс - площади прямоугольника. В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу третьего порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{пр(мод)}}^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_0(x)\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)dx = h_{i+1} f_{i+\frac{1}{2}} . \qquad O(h^3)$$

Составная квадратурная формула метода прямоугольников (модифицированного) на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пр(мод)}}^{b} = h\left(f_{1/2} + f_{3/2} + \ldots + f_{n-\frac{1}{2}}\right) = h\sum_{i=0}^{n-1} f_{i+\frac{1}{2}} .$$

Формула метода прямоугольников (модифицированного) является точной для многочленов первой степени и обладает вторым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{пр(мод)}}^{b}\right| \le \frac{M_2}{24}\left(b-a\right)h^2 ,$$

где $M_2 = \max\limits_{[a,b]} \left|f''(x)\right|$.

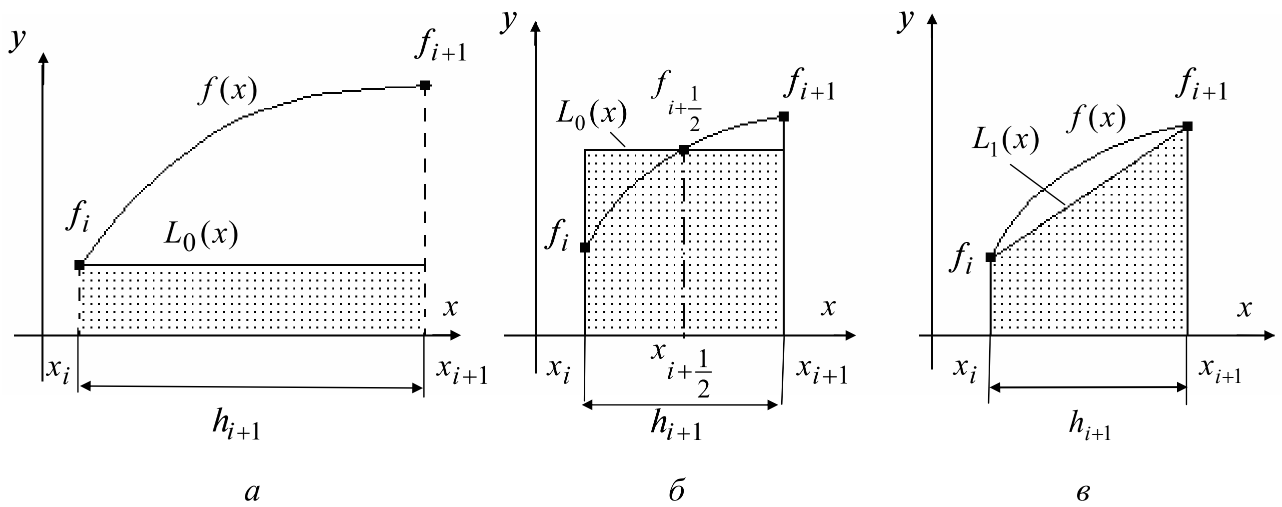


Рис. 2

А3. Метод трапеций. Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом первой степени $L_1(x)$ с узловыми значениями x_i, x_{i+1} (рис. 2,*в*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс – площади трапеции (произведению полусуммы оснований на высоту). В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу третьего порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{тр}}^{i+1} = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} L_1(x)\,dx = h_{i+1}\frac{f_i + f_{i+1}}{2}. \qquad O(h^3)$$

Составная квадратурная формула метода трапеций на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{тр}}^{b} = h\left(\frac{f_0 + f_1}{2} + \frac{f_1 + f_2}{2} + \ldots + \frac{f_{n-1} + f_n}{2}\right) = \frac{h}{2}\left[f_0 + 2\left(f_1 + f_2 + .. + f_{n-1}\right) + f_n\right] =$$

$$= \frac{h}{2}\left(f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n\right).$$

Формула метода трапеций является точной для многочленов первой степени и обладает вторым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{тр}}^b\right| \le \frac{M_2}{12}(b-a)h^2,$$

где $M_2 = \max\limits_{[a,b]} \left|f''(x)\right|$.

Заметим, что порядок аппроксимации составных квадратурных формул прямоугольников и трапеций на единицу меньше порядка аппроксимации одноинтервальной формулы.

Б. ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Пусть отрезок $[a, b]$ разбит на четное количество одинаковых частичных отрезков, т.е. $n = 2k$, где k – число пар. На частичном отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$, которому соответствует трехточечный шаблон $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ (по одной паре отрезков при $r = 1,\ s = 1$), функция $f(x)$ заменяется параболой (интерполяционным многочленом $L_2(x)$ второй степени), проходящей через три заданные на шаблоне точки. В каждом методе значение интеграла $I_{i-1}^{i+1} = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx$ аппроксимируется величиной $\hat{I}_{i-1}^{i+1}$, равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс и получаемой по *двухинтервальной формуле*.

Метод парабол. На регулярном шаблоне при $h = \text{const}$, подсчитывая площадь под параболой (рис. 3), можно получить *двухинтервальную квадратурную формулу парабол,* или *формулу Симпсона*:

$$\hat{I}_{i-1,\text{пар}}^{i+1} = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}\right). \qquad O(h^5)$$

Составная квадратурная формула метода парабол имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пар}}^{b} = \frac{h}{3}\left[f_0 + 4(f_1 + f_3 + \ldots + f_{2k-1}) + 2(f_2 + f_4 + \ldots + f_{2k-2}) + f_n\right] =$$

$$= \frac{h}{3}\left[f_0 + 4\sum_{i=1}^{k} f_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{k-1} f_{2i} + f_{2k}\right].$$

Подчеркнем, что в составной квадратурной формуле парабол индекс «k» указывает на число пар отрезков разбиения, которое предполагается четным ($n = 2k$). Если это условие не выполняется, то интеграл вычисляется для четного количества отрезков и к полученному значению добавляется величина I_{n-1}^{n}, рассчитанная с порядком $O(h^5)$ по формулам, приведенным далее.

Формула метода парабол является точной для многочленов третьей степени и имеет четвертый порядок аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{пар}}^{b}\right| \le \frac{M_4}{180}(b-a)h^4,$$

где $M_4 = \max\limits_{[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|$.

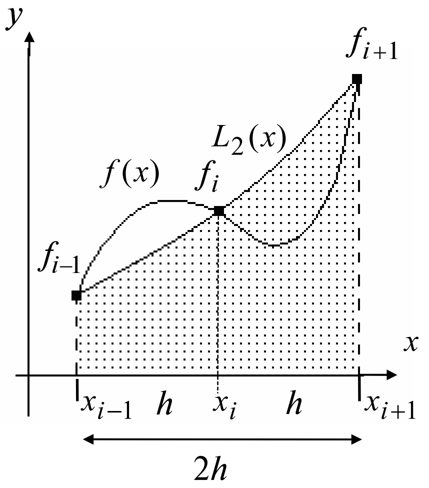


Рис. 3

В. ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОТОЧЕЧНЫХ ШАБЛОНОВ

Рассмотрим применение четырех-, пяти-, семиточечных шаблонов.

В1. Метод Боде. *Четырехинтервальная формула Боде* на пятиточечном шаблоне $Ш_{5,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}\right)$, где $r = 2,\ s = 2$ (рис. 4,*б*):

$$\hat{I}_{i-2,c}^{\,i+2} = \frac{2h}{45}(7f_{i-2} + 32f_{i-1} + 12f_i + 32f_{i+1} + 7f_{i+2}) \qquad \left(O(h^7)\right).$$

В2. Метод Уэддля. *Шестиинтервальная формула Уэддля* на семиточечном шаблоне $Ш_{7,i} = \left(x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}\right)$, где $r = 3,\ s = 3$ (рис. 4,*в*):

$$\hat{I}_{i-3,c}^{\,i+3} = \frac{3h}{10}(f_{i-3} + 5f_{i-2} + f_{i-1} + 6f_i + f_{i+1} + 5f_{i+2} + f_{i+3}) \qquad \left(O(h^7)\right).$$

В3. Методы Ньютона–Котеса. Приведем два частных случая:

– трехинтервальная формула на четырехточечном шаблоне $Ш_{4,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right)$, где $r = 2,\ s = 1$ (формула «трех восьмых», рис. 4,*а*):

$$\hat{I}_{i-2,c}^{\,i+1} = \frac{3h}{8}(f_{i-2} + 3f_{i-1} + 3f_i + f_{i+1}) \qquad \left(O(h^5)\right);$$

– шестиинтервальная формула на семиточечном шаблоне $Ш_{7,i} = \left(x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}\right)$, где $r = 3,\ s = 3$ (рис. 4,*в*):

$$\hat{I}_{i-3,c}^{\,i+3} = \frac{h}{140}(41f_{i-3} + 216f_{i-2} + 27f_{i-1} + 272f_i + 27f_{i+1} + 216f_{i+2} + 41f_{i+3}) \qquad \left(O(h^9)\right).$$

Искомое приближенное значение интеграла $\hat{I}_a^b$ получается суммированием по всем частичным отрезка

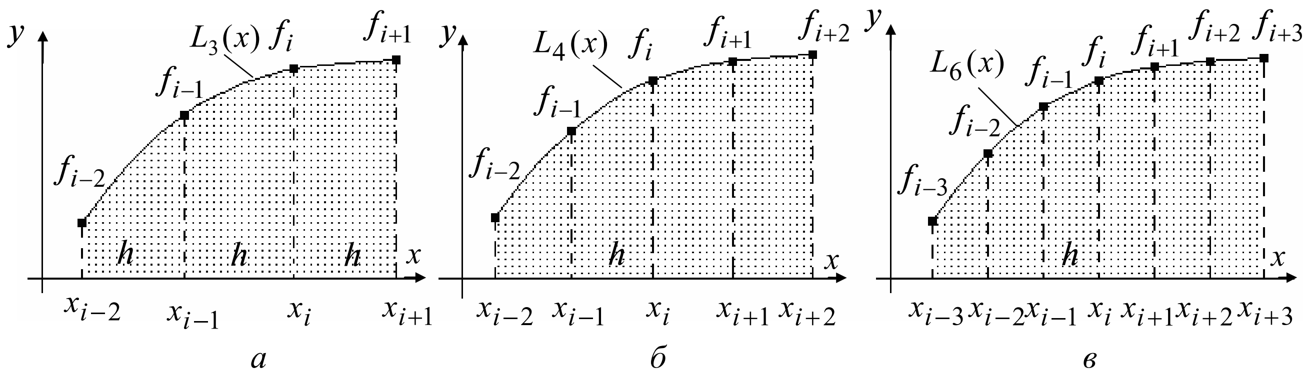


Рис. 4

Методика вычисления определенного интеграла с заданной точностью и априорным нахождением шага интегрирования

Шаг 1. Для правой части формулы оценки погрешностей вычислить константу $M_p = \max\limits_{[a,b]} \left| f^{(p)}(x) \right|$. С этой целью необходимо продифференцировать функцию p раз и вычислить ее максимальное значение на отрезке $[a,b]$, где p – порядок аппроксимации квадратурной формулы.

Шаг 2. Из условия

$$\frac{M_p}{A}(b-a)\cdot h^p \le \varepsilon \ ,$$

где $\dfrac{M_p}{A}$ – константа, входящая в правую часть оценки погрешностей, определяется величина h: $\quad h \le \sqrt[p]{\dfrac{A\cdot\varepsilon}{M_p(b-a)}}$.

Шаг 3. По значению h вычислить n – количество разбиений отрезка $[a,b]$ и сформировать сеточное представление функции $y = f(x)$, т.е. $y_i = f(x_i)$, $x_0 = a$; $x_1 = a+h$; $x_2 = a+2h$; . . . ; $x_n = a + n\cdot h$ $(i = 0,1,\ldots,n)$.

Шаг 4. Полученную сеточную функцию подставить в правую часть соответствующей квадратурной формулы и вычислить искомое значение $\hat{I}_a^b$. При этом значение интеграла в силу справедливости оценки удовлетворяет заданной точности ε.

Замечания.

Рассмотренный способ вычисления интегралов, когда с использованием оценок и точности ε предварительно вычисляется шаг интегрирования h, является способом *с априорным определением шага* h.

Пример 2. Вычислить интегралы

$$I_1=\int_0^2 x\,dx\ ,\qquad I_2=\int_0^2 x^2\,dx\,,\qquad I_3=\int_0^2 x^3\,dx\,,\qquad I_4=\int_0^2 x^4\,dx$$

по формулам прямоугольников (модифицированной), трапеций, парабол с шагом $h=1$. Найти оценки погрешностей.

☐ Точные значения интегралов:

$$I_1=\int_0^2 x\,dx=\frac{x^2}{2}\Bigg|_0^2=2\,,\qquad I_2=\int_0^2 x^2\,dx=\frac{x^3}{3}\Bigg|_0^2=\frac{8}{3}\,,$$

$$I_3=\int_0^2 x^3\,dx=\frac{x^4}{4}\Bigg|_0^2=4\,,\qquad I_4=\int_0^2 x^4\,dx=\frac{x^5}{5}\Bigg|_0^2=\frac{32}{5}=6{,}4\,.$$

Для формул прямоугольников и трапеций порядок аппроксимации $p=2$, а для формулы парабол $p=4$. В поставленной задаче $a=0,\ b=2$. Сначала получим оценки погрешностей априорным способом.

Найдем $M_2=\max\limits_{[0;2]}\left|f''(x)\right|$:

$M_2=0$ для функции $f(x)=x$; $M_2=2$ для функции $f(x)=x^2$;

$M_2=12$ для функции $f(x)=x^3$; $M_2=48$ для функции $f(x)=x^4$.

Найдем $M_4=\max\limits_{[0;2]}\left|f^{(4)}(x)\right|$:

$M_4=0$ для функций $f(x)=x$; $f(x)=x^2$; $f(x)=x^3$;

$M_4=24$ для функции $f(x)=x^4$.

Справедливы оценки:

$$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{M_2}{24}(b-a)h^2;\qquad \left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{M_2}{12}(b-a)\,h^2;\qquad \left|\varepsilon_{\text{пар}}\right|\le\frac{M_4}{180}(b-a)\,h^4\,.$$

Оценки погрешностей формулы прямоугольников (модифицированной):

$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|=0$ для $f(x)=x$; $\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{2}{24}\cdot2\cdot1^2=0{,}16(6)$ для $f(x)=x^2$;

$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{12}{24}\cdot2\cdot1^2=1$ для $f(x)=x^3$; $\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{48}{24}\cdot2\cdot1^2=8$ для $f(x)=x^4$.

Оценки погрешностей формулы трапеций:

$\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|=0$ для $f(x)=x$; $\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{2}{12}\cdot2\cdot1^2=0{,}3(3)$ для $f(x)=x^2$;

$\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{12}{12}\cdot2\cdot1^2=2$ для $f(x)=x^3$; $\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{48}{12}\cdot2\cdot1^2=8$ для $f(x)=x^4$.

Оценки погрешностей формулы парабол:

$$\left|\varepsilon_{\text{пар}}\right| = 0 \quad \text{для } f(x) = x; \quad f(x) = x^2; \quad f(x) = x^3;$$

$$\left|\varepsilon_{\text{пар}}\right| \le \frac{24}{180} \cdot 2 \cdot 1^2 = 0{,}26(6) \quad \text{для } f(x) = x^4.$$

Таким образом, подтверждается факт, что формулы прямоугольников (модифицированная) и трапеций должны быть точными для многочленов первой степени, а формула парабол – для многочленов не выше третьей степени.

Теперь рассчитаем значения интегралов по соответствующим квадратурным формулам.

При $h = 1$ сеточное представление функций имеет вид

$$f_0 = f(0), \quad f_{\frac{1}{2}} = f\left(\frac{1}{2}\right), \quad f_1 = f(1), \quad f_{\frac{3}{2}} = f\left(\frac{3}{2}\right), \quad f_2 = f(2).$$

По формуле прямоугольников получаем $\hat{I}_{\text{пр(мод)}} = h \cdot \left[f_{\frac{1}{2}} + f_{\frac{3}{2}} \right]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = 1 \cdot \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\right] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = 1 \cdot \left[\frac{1}{4} + \frac{9}{4}\right] = 2{,}5 \quad (0{,}16(6));$$

$$\hat{I}_3 = 1 \cdot \left[\frac{1}{8} + \frac{27}{8}\right] = \frac{7}{2} = 3{,}5 \quad (0{,}5); \qquad \hat{I}_4 = 1 \cdot \left[\frac{1}{16} + \frac{81}{16}\right] = \frac{82}{16} = 5{,}125 \quad (1{,}275).$$

Здесь в скобках указана величина фактической ошибки.

По формуле трапеций находим $\hat{I}_{\text{тр}} = \frac{h}{2} \cdot [f_0 + 2f_1 + f_2]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 2] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 4] = 3 \quad (0{,}3(3));$$

$$\hat{I}_3 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 8] = 5 \quad (1); \qquad \hat{I}_4 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 16] = 9 \quad (2{,}6).$$

По формуле парабол, учитывая, что $n = 2k = 2$ и, следовательно, $k = 1$, получаем $\hat{I}_{\text{пар}} = \frac{h}{3} \cdot [f_0 + 4f_1 + f_2]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 2] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 4] = \frac{8}{3} \quad (0);$$

$$\hat{I}_3 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 8] = 4 \quad (0); \qquad \hat{I}_4 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 16] = \frac{20}{3} = 6{,}6(6) \quad (0{,}26(6)).$$

Очевидно, полученные фактические погрешности соответствуют вычисленным ранее оценкам. ■

Лекция 16

8. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается проблема решения *систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка*, связывающих независимую переменную x, неизвестные функции $y_1(x),\dots,y_n(x)$ и их производные $y_1'(x),\dots,y_n'(x)$.

В случае, если уравнения разрешимы относительно производных, систему можно записать в *нормальной форме Коши*:

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1,\dots,y_n),$$
$$\frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1,\dots,y_n),$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$
$$\frac{dy_n}{dx} = f_n(x, y_1,\dots,y_n),$$

где $f_i(x, y_1,\dots,y_n)$, $i = \overline{1,n}$, – известные функции.

Решением системы называется совокупность n функций $y_1(x),\dots,y_n(x)$, непрерывных на некотором интервале (a,b), такая, что подстановка этих функций в систему обращает все уравнения в тождества.

Задача Коши для системы состоит в нахождении решения системы, удовлетворяющего начальным условиям:

$$y_1(x_0) = y_{10},\ y_2(x_0) = y_{20},\dots,\ y_n(x_0) = y_{n0},$$

где $y_{10}, y_{20},\dots,y_{n0}$ – известные числа.

В векторной форме задача Коши имеет вид

$$Y' = F(x,Y), \quad Y(x_0) = Y_0,$$

где $Y = (y_1,\dots,y_n)^T$, $F(x,Y) = (f_1(x,Y),\dots,f_n(x,Y))^T$, $Y_0 = (y_{10},\dots,y_{n0})^T$.

Теорема (о существовании и единственности решения задачи Коши).

Пусть выполнены следующие условия:

а) *функции* $f_i(x, y_1,\dots,y_n)$, $i = \overline{1,n}$, *определены и непрерывны в некоторой замкнутой области* $\overline{D}$, *а также имеют в* $\overline{D}$ *ограниченные частные производные по переменным* $y_1,\dots,y_n$;

б) *точка* $(x_0, y_{10}, y_{20},\dots,y_{n0})$ *лежит внутри области* $\overline{D}$.

Тогда решение задачи Коши существует и единственно.

З а м е ч а н и я.

1. Во многих практических приложениях независимая переменная обозначается через t и имеет смысл времени, поэтому задача Коши называется начальной задачей.

2. Чтобы решить задачу Коши для дифференциального уравнения n-го порядка:

$$y^{(n)} = f(x, y(x), ..., y^{(n-1)}(x)),$$

$$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0, ..., y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)},$$

где $x_0 \in (a,b)$, $y_0, y'_0, ..., y_0^{(n-1)}$ – заданные числа, ее необходимо привести к системе n уравнений первого порядка. Обозначая $y_1(x) = y(x), y_2(x) = y'(x), ..., y_n(x) = y^{(n-1)}(x)$, получаем

$$\begin{aligned}
&\frac{dy_1}{dx} = y_2, && y_1(x_0) = y_0,\\
&\frac{dy_2}{dx} = y_3, && y_2(x_0) = y'_0,\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
&\frac{dy_n}{dx} = f(x, y_1, ..., y_n), && y_n(x_0) = y_0^{(n-1)}.
\end{aligned}$$

3. Чтобы упростить изложение и в силу того, что численные методы легко обобщаются на системы уравнений, в дальнейшем будем рассматривать решение задачи Коши для уравнения первого порядка

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \; x \in (a,b). \tag{*}$$

Чтобы записать формулы для решения задачи Коши необходимо заменить функцию $y(x)$ на вектор-функцию $Y(x)$, $f(x,y)$ на $F(x,Y)$, а y_0 – на Y_0.

ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

Численное решение задачи (*) ищется в *узлах сетки* $\Omega_n = \{x_0, x_1, ..., x_n\}$, где $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$, $i = \overline{0, n-1}$, – расстояние между соседними узлами, называемое *шагом интегрирования* (параметром сетки). Если $h_{i+1} = h = \text{const}$, сетка называется *равномерной* (*регулярной*), а если $h_{i+1} = \text{var}$ – *неравномерной* (*нерегулярной*). В случае равномерной сетки узлы находятся по формуле $x_i = x_0 + ih, i = \overline{0, n}$.

Решение находится в виде последовательности значений $\hat{y}_0, \hat{y}_1, \hat{y}_2, ..., \hat{y}_n$, являющихся приближением значений $y_0, y(x_1), y(x_2), ..., y(x_n)$ точного решения $y(x)$ в узлах сетки Ω_n (рис. 1).

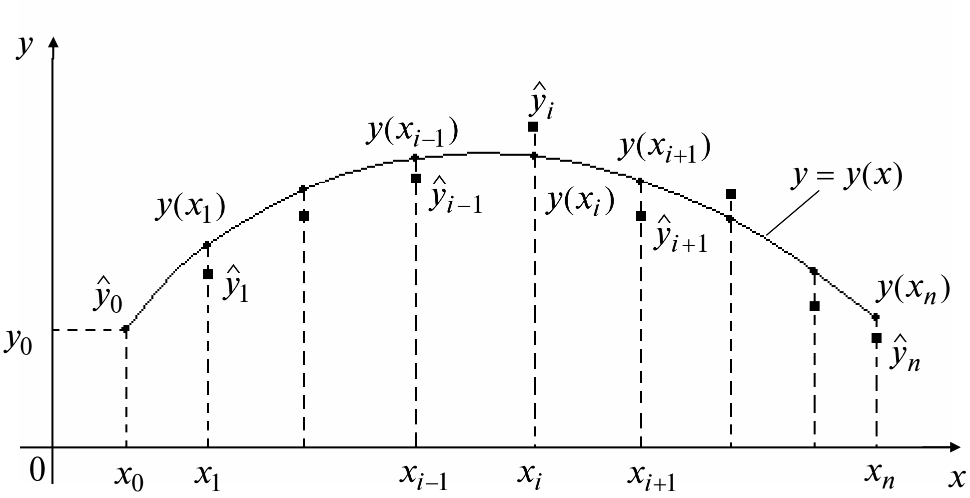


Рис. 1

Численные дискретные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений, позволяющие найти решение только в узлах сетки, делятся на две группы: *явные* и *неявные*.

Значение $\hat{y}_{i+1}$ на $(i+1)$-м шаге может определяться *явно*:

$$\hat{y}_{i+1} = \Phi(x_{i-k+1},\dots,x_{i-1},x_i,\hat{y}_{i-k+1},\dots,\hat{y}_{i-1},\hat{y}_i),$$

где $\Phi(.)$ – некоторая функция, зависящая от конкретного метода (кроме последней рассчитанной точки $(x_i,\hat{y}_i)$ могут использоваться еще $(k-1)$ предыдущих точек), или *неявно*:

$$\hat{y}_{i+1} = \Phi(x_{i-k+1},\dots,x_{i-1},x_i,x_{i+1},\hat{y}_{i-k+1},\dots,\hat{y}_{i-1},\hat{y}_i,\hat{y}_{i+1}),$$

где искомая величина $\hat{y}_{i+1}$ входит одновременно и в левую, и в правую часть.

Явные и неявные методы делятся также на *одношаговые* и *многошаговые* (k-шаговые). В одношаговых методах для расчета очередной точки $(x_{i+1},\hat{y}_{i+1})$ требуется информация только о последней рассчитанной точке $(x_i,\hat{y}_i)$. В k-шаговых методах для нахождения точки $(x_{i+1},\hat{y}_{i+1})$ требуется информация о k предыдущих точках.

Формулы явных или неявных методов в общем случае представляют собой нелинейные уравнения относительно $\hat{y}_{i+1}$ и называются *разностными схемами*.

Локальной ошибкой численного метода на $(i+1)$-м шаге называется величина

$$\varepsilon_{i+1}(h) = \hat{y}_{i+1} - y(x_{i+1}),$$

где $y(x_{i+1})$ – значение точного решения при $x = x_{i+1}$, а $\hat{y}_{i+1}$ – приближенное решение, получаемое по формулам при условии, что вместо приближенных значений $\hat{y}_i,\hat{y}_{i-1},\dots,\hat{y}_{i-k+1}$ используются значения, соответствующие точному решению, т.е. $y(x_i), y(x_{i-1}),\dots, y(x_{i-k+1})$.

Глобальной ошибкой называется величина $e_n(h) = \hat{y}_n - y(x_n)$, где $\hat{y}_n$ – значение, получаемое по формулам при $i = n - 1$.

Глобальная ошибка определяется:

а) ошибками округления и ошибками арифметических действий, обусловленными числом разрядов компьютера и характером выполняемых операций для расчета значения искомой функции в очередной точке x_{i+1};

б) методическими ошибками, определяемыми выбранным алгоритмом;

в) переходными ошибками, обусловленными тем, что при расчете значения $\hat{y}_{i+1}$ вместо точных значений $y(x_i), y(x_{i-1}),..., y(x_{i-k+1})$ берутся приближенные значения $\hat{y}_i, \hat{y}_{i-1},..., \hat{y}_{i-k+1}$, полученные на предыдущих шагах.

Локальные ошибки «переносятся» в точку x_n и формируют глобальную ошибку.

Число p называется *порядком (точностью) численного метода*, если его глобальная ошибка есть O большое от h^p, т.е. $e_n(h) = O(h^p)$.

Пояснение. Пусть $R(h)$ – некоторая функция переменной h (как правило, $R(h)$ – остаточное слагаемое некоторой аппроксимационной формулы) с конечной областью определения D_R на полуоси $h > 0$, причем $h \in D_R$. Тогда, если при некотором $h \le h_0$ справедливо неравенство $|R(h)| \le ch^k$, где $c = \text{const}$, не зависящая от h, k – целое число, $h_0 > 0$, то пишут $R(h) = O(h^k)$ и говорят, что $R(h)$ есть «O большое от h^k» при $h \to 0$.

На практике в качестве характеристики точности метода часто используется величина $\varepsilon(h) = \max\limits_{i=0,1,...,n} \left| \hat{y}_i - y(x_i) \right|$.

Можно показать, что если локальная ошибка имеет порядок $(p+1)$, т.е. $\varepsilon_{i+1}(h) = O(h^{p+1})$, то глобальная погрешность имеет на единицу меньший порядок, т.е. $e_n(h) = O(h^p)$.

Перейдем теперь к рассмотрению устойчивости численных методов. Она проверяется на «тестовом примере»

$$y' = \mu y, \quad y(0) = 1,$$

где μ – в общем случае комплексная константа. Дифференциальное уравнение является простейшим линейным уравнением, и для него можно получить значимые критерии устойчивости в явной форме.

Метод называется *ограниченно устойчивым*, если существует такое число $h_{\text{кр.}} > 0$, что при использовании метода для решения тестового примера, где $\operatorname{Re}\mu < 0$, с шагом $0 < h < h_{\text{кр.}}$ при $i \to \infty$ глобальная ошибка ограничена. Величина $h_{\text{кр.}}$ называется *критическим шагом*. Если $h > h_{\text{кр.}}$, глобальная ошибка может неограниченно возрастать. В ограниченно устойчивых методах при задании величины шага h необходимо учитывать значение критического шага $h_{\text{кр.}}$. Для сложных дифференциальных уравнений и систем нахождение $h_{\text{кр.}}$ является самостоятельной задачей, а свойство ограниченной устойчивости предупреждает вычислителя о возможных проблемах. Поэтому на практике становится актуальной задача конструирования таких методов, которые были бы устойчивы при любом значении шага, а его величина выбиралась бы только исходя из желаемой точности расчетов (при этом класс решаемых задач может быть ограничен).

Метод называется *A-устойчивым*, если при его применении с любым фиксированным положительным шагом h все численные решения тестового примера с комплексной константой μ ($\operatorname{Re}\mu < 0$) стремятся к нулю при $i \to \infty$.

A. ЯВНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

A1. Явный метод Эйлера

Рассмотрим проблему нахождения численного решения задачи Коши:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 .$$

Вводится в общем случае неравномерная сетка $\Omega_n = (x_0, x_1, ..., x_i, x_{i+1}, ..., x_n)$. Величина шага $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ выражается через узловые точки. Для аппроксимации производной $\left.\left(\frac{dy}{dx}\right)\right|_{x=x_i}$ используем формулу, записанную на двухточечном шаблоне

$$Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1}): \left.\left(\frac{dy}{dx}\right)\right|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} + O(h_{i+1}) \qquad \left(\frac{h_{i+1}}{2} M_{2,i}\right).$$

Далее заменяется правая часть уравнения ее сеточным представлением, т.е. $f(x, y) \to f(x_i, y_i)$, а вместо $y(x)$ рассматривается сеточная функция $\hat{y}_i \approx y(x_i)$, которая определяется только в точках сетки. Выполняется подстановка аппроксимаций производной и правой части в дифференциальное уравнение:

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} + O(h_{i+1}) = f(x_i, y_i) .$$

После отбрасывания остаточных слагаемых получается *явная схема Эйлера первого порядка* (*явный метод Эйлера*):

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_i, \hat{y}_i), \quad i = \overline{0, n-1}, \quad \hat{y}_0 = y_0;$$

Порядок точности метода, как правило, определяется порядком аппроксимации схем, *явный метод Эйлера является ограниченно устойчивым* с критическим шагом $h_{\text{кр.}} = -\frac{2}{\mu}$ (см. тестовый пример).

А2. Метод Эйлера-Коши

Для аппроксимации производной применяется формула:

$$\left.\left(\frac{dy}{dx}\right)\right|_{x=x_i} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) \qquad \left(\frac{h^2}{6} M_{3,i}\right).$$

Выполняется подстановка аппроксимаций производной и правой части в дифференциальное уравнение:

$$\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) = f(x_i, y_i) \ .$$

После отбрасывания остаточных слагаемых получается явная схема *метода Эйлера–Коши второго порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_{i-1} + 2h \cdot f(x_i, \hat{y}_i), \ \ i = \overline{1, n-1} \, .$$

Для начала расчетов требуется иметь две «разгонные» точки $\hat{y}_0, \hat{y}_1$. Первая определяется известным начальным условием $\hat{y}_0 = y_0$, а вторая может быть найдена с помощью другого метода, например, по формуле: $\hat{y}_1 = y_0 + h_1 f(x_0, y_0)$.

А3. Модифицированный метод Эйлера

Модифицированный метод Эйлера второго порядка:

$$\hat{y}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} f(x_i, \hat{y}_i), \qquad i = \overline{0, n-1},$$

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}}\right), \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Интервал устойчивости $h\mu \in (-2, 0)$ (здесь μ – действительное число в тестовом примере) модифицированного метода Эйлера совпадает с интервалом устойчивости явного метода Эйлера.

А4. Методы Рунге-Кутты

Формулы семейства *методов Рунге–Кутты* имеют следующую структуру:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} \cdot \left[b_1 K_{1,i} + b_2 K_{2,i} + \cdots + b_s K_{s,i} \right], \quad \hat{y}_0 = y_0, \quad i = \overline{0, n-1},$$

где $K_{1,i} = f(x_i, \hat{y}_i)$;

$K_{2,i} = f(x_i + c_2 h_{i+1},\, \hat{y}_i + h_{i+1}\, a_{2,1} K_{1,i})$;

$K_{3,i} = f(x_i + c_3 h_{i+1},\, \hat{y}_i + h_{i+1}\, (a_{3,1} K_{1,i} + a_{3,2} K_{2,i})$;

$\vdots$

$K_{s,i} = f(x_i + c_s h_{i+1},\ \hat{y}_i + h_{i+1}\, (a_{s,1} K_{1,i} + a_{s,2} K_{2,i} + \cdots + a_{s,s-1} K_{s-1,i})$,

где s – число стадий (этапов), $K_{s,i}$ – значения коэффициентов схемы Рунге–Кутты, вычисленные на основе правой части дифференциального уравнения, $c_j,\, j = \overline{2, s}$; $a_{l,m}, l = \overline{2, s}; m = \overline{1, s-1}$; $b_k, k = \overline{1, s}$. Первый индекс в обозначениях коэффициентов является порядковым номером, а второй соответствует индексу точки x_i – началу отрезка $[x_i, x_{i+1}]$, на котором производится расчет.

В некоторых методах кроме вычисления приближенного решения $\hat{y}_{i+1}$ определяется еще дополнительное значение $\tilde{y}_{i+1}$ по формуле

$$\tilde{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} \cdot \left\lfloor \tilde{b}_1 K_{1,i} + \tilde{b}_2 K_{2,i} + \cdots + \tilde{b}_s K_{s,i} \right\rfloor,$$

порядок которого, как правило, на единицу больше или меньше обеспечиваемого выражением для $\hat{y}_{i+1}$. Величина $\left|\hat{y}_{i+1} - \tilde{y}_{i+1}\right|$ служит для учета погрешности и управления величиной шага.

Наибольшее распространение в вычислительной практике нашел *метод Рунге–Кутты четвертого порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{6}\left(K_{1,i} + 2K_{2,i} + 2K_{3,i} + K_{4,i}\right), \quad \hat{y}_0 = y_0, \quad i = \overline{0, n-1},$$

где $K_{1,i} = f_i = f(x_i, \hat{y}_i)$, $\quad K_{2,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} K_{1,i}\right)$,

$$K_{3,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} K_{2,i}\right), \quad K_{4,i} = f\left(x_i + h_{i+1}, \hat{y}_i + h_{i+1} \cdot K_{3,i}\right).$$

Схема является четырехчленной, первый коэффициент $K_{1,i}$ относится к точке x_i, второй и третий – к средней точке $x_i + \frac{h_{i+1}}{2}$, четвертый – к точке x_{i+1}. Для этой схемы выбираются следующие параметры: $s = 4$, $c_2 = c_3 = \frac{1}{2}$; $c_4 = 1$; $a_{2,1} = \frac{1}{2}$; $a_{3,1} = a_{4,1} = a_{4,2} = 0$; $a_{3,2} = \frac{1}{2}$; $a_{4,3} = 1$.

Метод Рунге–Кутты, как и методы Эйлера, является одношаговым, так как значение $\hat{y}_{i+1}$ вычисляется на основе текущего значения $\hat{y}_i$. По сравнению с явным методом Эйлера здесь на одной итерации требуется вычислять значение правой части решаемого уравнения четыре раза. Как и явный метод Эйлера, метод Рунге–Кутты не требует дополнительных разгонных точек, что позволяет легко менять шаг в процессе вычислений.

В *методе Рунге–Кутты пятого порядка точности* для расчета точки $\hat{y}_{i+1}$ используются следующие соотношения:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{6}\left(K_{1,i} + 4K_{3,i} + K_{6,i}\right), \quad \hat{y}_0 = y_0, \quad i = \overline{0, n-1},$$

где $\quad K_{1,i} = f(x_i, \hat{y}_i), \qquad K_{2,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}K_{1,i}\right),$

$$K_{3,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{4}(K_{1,i} + K_{2,i})\right), \quad K_{4,i} = f\left(x_i + h_{i+1}, \hat{y}_i - h_{i+1}K_{2,i} + 2h_{i+1} \cdot K_{3,i}\right);$$

$$K_{5,i} = f\left(x_i + \frac{2h_{i+1}}{3}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{27}(7K_{1,i} + 10K_{2,i} + K_{4,i})\right),$$

$$K_{6,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{25}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{625}(28K_{1,i} - 15K_{2,i} + 546K_{3,i} + 54K_{4,i} - 378K_{5,i}\right).$$

А5. Методы Адамса–Бэшфорта

Многошаговые *схемы Адамса–Бэшфорта*:
– *второго порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{2}[3f_i - f_{i-1}], \quad i = \overline{1, n-1};$$

– *третьего порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{12}[23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2}], \quad i = \overline{2, n-1};$$

– *четвертого порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{24}[55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}], \quad i = \overline{3, n-1};$$

– *пятого порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{720}[1901f_i - 2774f_{i-1} + 2616f_{i-2} - 1274f_{i-3} + 251f_{i-4}], \quad i = \overline{4, n-1},$$

где $f_i = f(x_i, \hat{y}_i)$.

Для начала расчетов по первой формуле требуются две «разгонные» точки: $\hat{y}_0, \hat{y}_1$, по второй формуле – три «разгонные» точки: $\hat{y}_0, \hat{y}_1, \hat{y}_2$, по третьей формуле – четыре «разгонные» точки: $\hat{y}_0, \hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3$, по четвертой формуле – пять «разгонных» точек: $\hat{y}_0, \hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3, \hat{y}_4$. Их необходимо вычислить с порядком точности не меньше порядка точности схемы.

Методы Адамса–Бэшфорта не позволяют изменять шаг в процессе расчетов. В отличие от метода Рунге–Кутты четвертого порядка в этих методах требуется вычислять только одно новое значение правой части решаемого уравнения (системы) вместо четырех. Высокая точность методов достигается при этом за счет учета информации о предыдущих точках. Напротив, в методе Рунге–Кутты, как и в других одношаговых методах, недостающую информацию о поведении правых частей системы получают в результате вычислений в специальным образом выбранных дополнительных точках.

А6. Явные методы Хемминга

Многошаговый *метод Хемминга четвертого порядка точности* может быть реализован тремя различными способами, в каждом из которых для нахождения точки $\hat{y}_{i+1}$ используются четыре предыдущие точки:

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{\hat{y}_i + \hat{y}_{i-1}}{2} + \frac{h}{48}[119 f_i - 99 f_{i-1} + 69 f_{i-2} - 17 f_{i-3}], \quad i = \overline{3, n-1};$$

или

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{2\hat{y}_{i-1} + \hat{y}_{i-2}}{3} + \frac{h}{72}[191 f_i - 107 f_{i-1} + 109 f_{i-2} - 25 f_{i-3}], \quad i = \overline{3, n-1};$$

или

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{\hat{y}_i + \hat{y}_{i-1} + \hat{y}_{i-2}}{3} + \frac{h}{36}[91 f_i - 63 f_{i-1} + 57 f_{i-2} - 13 f_{i-3}], \quad i = \overline{3, n-1};$$

где $f_i = f(x_i, \hat{y}_i)$. Для начала расчетов по любой из приведенных формул требуется четыре «разгонные» точки $\hat{y}_0, \hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3$.

А7. Методы прогноза и коррекции

Рассматриваемые здесь методы (схемы), называемые *составными*, известны под общим названием *методов прогноза и коррекции*. Из названия следует, что сначала «предсказывается» значение $\hat{y}_{i+1}$, а затем используется тот или иной метод для «корректировки» этого значения.

Таким образом, составные схемы включают в себя два шага (этапа) расчета очередного значения $\hat{y}_{i+1}$:

1. *Шаг «предиктор»* (предсказание), на котором рассчитывается предсказанное (предварительное) значение $\hat{y}_{i+1}^{(\text{П})}$.

2. *Шаг «корректор»* (коррекция), на котором предсказанное значение уточняется. В результате находится значение $\hat{y}_{i+1}^{(\text{К})}$, которое принимается за $\hat{y}_{i+1}$. Если промежуток интегрирования не исчерпан, оно далее используется при реализации очередного шага «предиктор» для нахождения следующего предсказанного значения $\hat{y}_{i+2}^{(\text{П})}$.

Первый шаг реализуется с помощью явных методов, а второй шаг основан на применении формул неявных методов, в правую часть которых вместо неизвестного значения $\hat{y}_{i+1}$ подставляется результат предсказания. Схемы такого типа называются также схемами «предиктор-корректор» и в итоге относятся к явным методам.

Приведем наиболее часто встречающиеся составные схемы.

- Предсказание с помощью явного метода Эйлера или метода Эйлера–Коши, коррекция по методу трапеций.

Шаг «предиктор»:

$$\hat{y}_{i+1}^{(\Pi)} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_i, \hat{y}_i) \ ,$$

или при условии $h_{i+1} = h = \text{const}$

$$\hat{y}_{i+1}^{(\Pi)} = \hat{y}_{i-1} + 2h \cdot f(x_i, \hat{y}_i),$$

где $\hat{y}_i$ и $\hat{y}_{i-1}$ рассчитаны на предыдущих шагах.

Шаг «корректор»:

$$\hat{y}_{i+1} \equiv \hat{y}_{i+1}^{(К)} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}[f(x_i, \hat{y}_i) + f(x_i + h_{i+1}, \hat{y}_{i+1}^{(\Pi)})] \ .$$

- Предсказание по методу Адамса–Бэшфорта третьего или четвертого порядка, коррекция по методу Адамса–Мултона четвертого порядка (см. неявные методы) (при $h_{i+1} = h = \text{const}$).

Шаг «предиктор»:

$$\hat{y}_{i+1}^{(\Pi)} = \hat{y}_i + \frac{h}{12}[23 f_i - 16 f_{i-1} + 5 f_{i-2}] \ ,$$

или

$$\hat{y}_{i+1}^{(\Pi)} = \hat{y}_i + \frac{h}{24}[55 f_i - 59 f_{i-1} + 37 f_{i-2} - 9 f_{i-3}] \ .$$

Шаг «корректор»:

$$\hat{y}_{i+1} \equiv \hat{y}_{i+1}^{(К)} = \hat{y}_i + \frac{h}{24}[f_{i-2} - 5 f_{i-1} + 19 f_i + 9 f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}^{(\Pi)})] \ .$$

- *Метод Хемминга четвертого порядка* (при $h_{i+1} = h = \text{const}$).

Шаг «предиктор»:

$$\hat{y}_{i+1}^{(\Pi)} = \hat{y}_{i-3} + \frac{4h}{3}[2 f_i - f_{i-1} + 2 f_{i-2}] \ .$$

Шаг «корректор»:

$$\hat{y}_{i+1} \equiv \hat{y}_{i+1}^{(К)} = \frac{1}{8}(9\hat{y}_i - \hat{y}_{i-2}) + \frac{3h}{8}[-f_{i-1} + 2 f_i + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}^{(\Pi)})] \ .$$

З а м е ч а н и е. Среди явных нашли также широкое применение методы Фельберга, Ингленда, Нюстрема, Милна, интерполяционные методы [3].

Лекция 17

Б. НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Б1. Неявный метод Эйлера

Формула *неявного метода Эйлера первого порядка точности*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \quad i = \overline{0, n-1}.$$

Подчеркнем, что свойство неявности схемы обусловлено наличием искомой величины $\hat{y}_{i+1}$ в левой и правой частях в общем случае нелинейного уравнения. Можно показать, что неявный метод Эйлера обладает свойством A-устойчивости. При реализации алгоритма решения задачи Коши неизвестное значение $\hat{y}_{i+1}$ вычисляется одним из методов решения нелинейных уравнений. Применение метода Ньютона связано с записью уравнения в форме

$$\hat{y}_{i+1} - \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) \equiv F(\hat{y}_{i+1}) = 0$$

и с дифференцированием функции $F(\hat{y}_{i+1})$, что увеличивает время расчетов из-за возможной сложности вычисления производных.

Как правило, используется метод простых итераций:

$$\hat{y}_{i+1}^{(k+1)} = \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}^{(k)}), \ k = 0,1,\ldots.$$

При применении методов Ньютона и простых итераций вначале задается или находится нулевое приближение решения по формуле $y_{i+1}^{(0)} = \hat{y}_i$ (так называемый «постоянный» прогноз) или явным методом Эйлера:

$$\hat{y}_{i+1}^{(0)} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_i, \hat{y}_i).$$

Итерации завершаются при выполнении условия окончания $\left| \hat{y}_{i+1}^{(k+1)} - \hat{y}_{i+1}^{(k)} \right| \le \varepsilon$, где ε – малое положительное число.

Б2. Метод трапеций

Формула *метода трапеций* - неявная одношаговая схема второго порядка точности:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}\left[f_i + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})\right] \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \ i = \overline{0, n-1},$$

где $f_i = f(x_i, \hat{y}_i)$. Подчеркнем, что свойство неявности схемы обусловлено наличием искомой величины $\hat{y}_{i+1}$ в левой и правой частях в общем случае нелинейного уравнения. Неизвестное значение $\hat{y}_{i+1}$ вычисляется одним из методов решения нелинейных уравнений. Можно показать, что метод трапеций является *A*-устойчивым.

Б3. Методы Адамса–Мултона

Многошаговые *неявные схемы Адамса–Мултона*:

– *первого порядка* (неявный метод Эйлера);

– *второго порядка* (метод трапеций);

– *третьего порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{12}[-f_{i-1} + 8f_i + 5f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})], \quad i = \overline{1, n-1};$$

– *четвертого порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{24}[f_{i-2} - 5f_{i-1} + 19f_i + 9f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})], \quad i = \overline{2, n-1};$$

и

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_{i-1} + \frac{h}{3}[f_{i-1} + 4f_i + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})], \ i = \overline{1, n-1} \ (\textit{неявная схема парабол});$$

– *пятого порядка*:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{720}[-19f_{i-3} + 106f_{i-2} - 264f_{i-1} + 646f_i + 251f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})], \quad i = \overline{3, n-1}.$$

где $f_i = f(x_i, \hat{y}_i), f_{i-1} = f(x_{i-1}, \hat{y}_{i-1}), f_{i-2} = f(x_{i-2}, \hat{y}_{i-2}), f_{i-3} = f(x_{i-3}, \hat{y}_{i-3})$.

Для расчетов по формулам требуется получить соответствующее число «разгонных» точек. Чтобы найти искомое значение $\hat{y}_{i+1}$, так же как в неявном методе Эйлера и методе трапеций, требуется решить в общем случае нелинейное уравнение.

З а м е ч а н и е. Среди неявных также получили распространение методы Гира, Милна, Хемминга, Рунге–Кутты [3].

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

Занятие 1. НЕОБХОДИМЫЕ И ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

Постановка задачи

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

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

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

Схема исследования функций на безусловный экстремум

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

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

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

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

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

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

Первый способ проверки достаточных и необходимых условий второго порядка.

Критерий проверки достаточных условий экстремума (критерий Сильвестра).

Если знаки угловых миноров строго положительны:

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

то точка чч x^* *является точкой локального минимума.*

Если знаки угловых миноров чередуются, начиная с отрицательного:

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

то точка x^* *является точкой локального максимума.*

Критерий проверки необходимых условий экстремума второго порядка

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

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

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

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

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

Таблица

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

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

☐ 1. Запишем необходимые условия экстремума первого порядка:

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

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

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

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

2. Проверим выполнение достаточных условий экстремума.

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

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

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

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

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

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

□ 1. Запишем необходимые условия экстремума первого порядка:

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

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

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

В результате решения системы получим две стационарные точки:

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

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

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

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

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

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

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

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

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

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

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

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

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

Пример 3. Найти экстремум функции $f(x) = -x_1^2 + 2x_1x_2 - x_2^2 - 4x_3^2$ на множестве R^3.

☐ 1. Выпишем необходимые условия экстремума первого порядка:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} = -2x_1 + 2x_2 = 0, \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} = 2x_1 - 2x_2 = 0, \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x_3} = -8x_3 = 0.$$

В результате решения системы получим бесконечное множество стационарных точек, удовлетворяющих соотношениям $x_1^* = x_2^*, x_3^* = 0$.

2. Проверим выполнение достаточных условий экстремума.

Первый способ. Матрица Гессе имеет вид $H(x^*) = \begin{pmatrix} -2 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -8 \end{pmatrix}$. Так как $\Delta_1 = -2 < 0,\ \Delta_2 = \begin{vmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{vmatrix} = 0,\ \Delta_3 = \begin{vmatrix} -2 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -8 \end{vmatrix} = 0$, то достаточные условия экстремума не выполняются. Согласно схеме (см. рис.) проверим необходимые условия второго порядка. Поступим аналогично решению примера 2.

Главные миноры первого порядка получаются из Δ_3 в результате вычеркивания двух строк и столбцов с одинаковыми номерами: –2, –2, –8. Главные миноры второго порядка получаются из Δ_3 в результате вычеркивания по одной строке и столбцу с одинаковым номером: 16, 16, 0. Главный минор третьего порядка совпадает с $\Delta_3 = 0$. Так как все главные миноры четного порядка неотрицательны, а все миноры нечетного порядка неположительны, то можно сделать вывод о том, что в исследуемых стационарных точках может быть максимум и требуется продолжение исследования.

Второй способ. Найдем собственные значения матрицы Гессе:

$$\begin{vmatrix} -2-\lambda & 2 & 0 \\ 2 & -2-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -8-\lambda \end{vmatrix} = \left(-8-\lambda\right)\left[\left(-2-\lambda\right)^2 - 4\right] = 0.$$

Отсюда $\lambda_1 = -8 < 0, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -4 < 0$, т.е. собственные значения неположительны. Поэтому в стационарных точках может быть максимум.

3. Функция $f(x)$ может быть записана в виде $f(x) = -\left(x_1 - x_2\right)^2 - 4x_3^2$. В каждой из найденной в п. 1 стационарной точке $f(x^*) = 0$. Исходя из структуры функции $f(x)$ можно сделать вывод о том, что для любых $x \in R^3$ справедливо: $f(x) \le f(x^*) = 0$. На основании определения 1.1 (см. лекцию 1) функция на множестве точек, удовлетворяющих условию $x_1^* = x_2^*, x_3^* = 0$, достигает глобального максимума. ■

Занятие 2.

НЕОБХОДИМЫЕ И ДОСТАТОЧНЫЕ УСЛОВИЯ УСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

А. ОГРАНИЧЕНИЯ ТИПА РАВЕНСТВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f\left(x_1,\ldots,x_n\right)$ и функции ограничений $g_j(x) = g_j\left(x_1,\ldots,x_n\right) = 0, j = 1,\ldots,m$, определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x), \quad f(x^*) = \max_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \,\middle|\, g_j(x) = 0, j = 1,\ldots,m;\ m < n \right\}$.

Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Составить обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x,\lambda_0,\lambda) = \lambda_0 f(x) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j g_j(x).$$

Шаг 2. Записать необходимые условия экстремума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x^*,\lambda_0^*,\lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1,\ldots,n$;

б) $g_j(x^*) = 0, \quad j = 1,\ldots,m$.

Шаг 3. Решить систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0^* = 0$.

Второй случай: $\lambda_0^* \ne 0$ $\Big($при этом поделить условие «а» на λ_0^* и заменить $\dfrac{\lambda_j^*}{\lambda_0^*}$ на $\lambda_j^*\Big)$.

В результате решения найти условно-стационарные точки x^*, выделив из них полученные при $\lambda_0^* \ne 0$ (они могут быть регулярными точками экстремума).

Шаг 4. Для выделенных на шаге 3 точек проверить выполнение достаточных условий экстремума:

а) записать выражение для второго дифференциала классической функции Лагранжа в точке (x^*,λ^*):

$$d^2L(x^*,\lambda^*) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 L(x^*,\lambda^*)}{\partial x_i \partial x_j} dx_i\, dx_j \;;$$

б) записать систему в точке x^*:

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i}\; dx_i = 0\,, \qquad j = 1,\ldots,m;$$

в) из предыдущей системы выразить любые m дифференциалов dx_i через остальные ($n-m$) и подставить в $d^2L(x^*,\lambda^*)$;

г) если $d^2L(x^*,\lambda^*) > 0$ при ненулевых dx, то в точке x^* – условный локальный минимум. Если $d^2L(x^*,\lambda^*) < 0$ при ненулевых dx, то в точке x^* – условный локальный максимум. Если достаточные условия экстремума не выполняются, следует проверить выполнение необходимых условий второго порядка, следуя аналогичной процедуре. Если они выполняются, то требуется дополнительное исследование, а если не выполняются, то в точке x^* нет условного экстремума.

Шаг 5. Вычислить значения функции в точках условного экстремума.

З а м е ч а н и я.

1. Иногда удается проверить условие линейной независимости градиентов ограничений на множестве X. Если оно выполняется, то на шаге 1 следует записать классическую функцию Лагранжа, на шаге 2 можно записывать сразу систему при $\lambda_0 = 1$, а на шаге 3 отсутствует случай $\lambda_0^* = 0$.

2. Для графического решения задачи (при $n = 2, m = 1$) следует:

а) построить множество допустимых решений X;

б) построить семейство линий уровня целевой функции и найти точки их касания с кривыми, описывающими ограничения. Эти точки являются «подозрительными» на условный экстремум;

в) исследовать поведение целевой функции при движении вдоль ограничения к исследуемой точке и от нее. Классифицировать точки, используя определение экстремума (см. определения 1.1 и 1.2 – лекция 1).

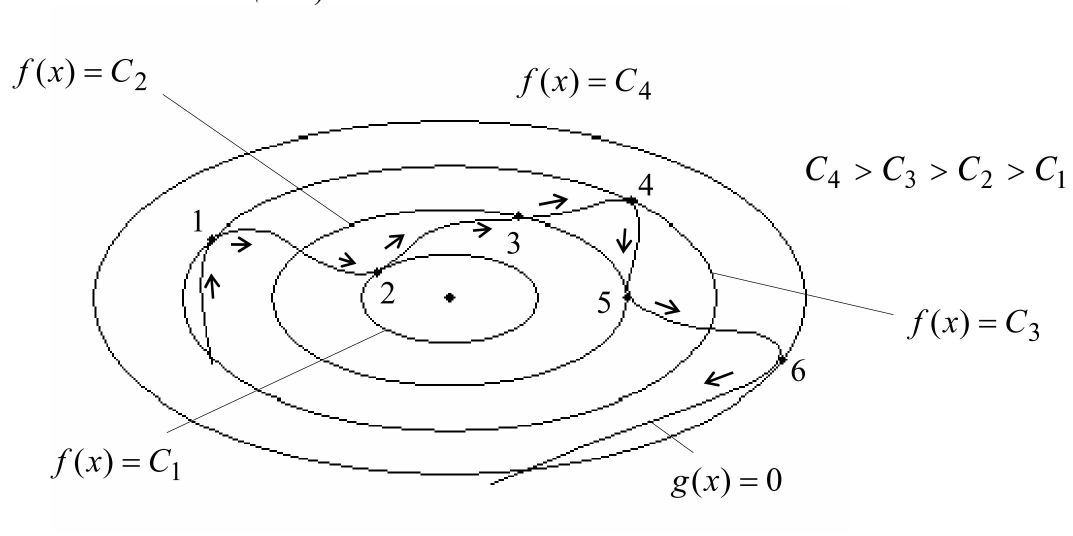


Рис. 1

На рис. 1 в точках 1 – 2, 4 – 6 линии уровня касаются ограничения. Исследование поведения функции в этих точках при движении по стрелкам показывает, что в точках 1, 4, 6 – локальный максимум, так как при приближении к ним функция возрастает, а затем убывает; в точках 2, 5 – локальный минимум, так как при приближении к ним функция убывает, а затем возрастает; в точке 3 нет условного экстремума, поскольку при приближении к ней и удалении дальше от нее функция возрастает.

3. При решении примеров для упрощения записи на шагах 2 и 3 алгоритма будем опускать знак «$*$», оставляя его только для значений x и λ, соответствующих условно-стационарным точкам.

Пример 1. Найти условный экстремум в задаче

$$f(x) = x_1 + x_2 \to \text{extr},$$

$$g_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0.$$

□ Проверим условие регулярности. Так как $\nabla g_1(x) = \left(2x_1,\, 2x_2\right)^T \neq 0$ для всех $x \in X$, то условие выполняется (см. определение 3.6 – лекция 2). Поэтому будем пользоваться классической функцией Лагранжа.

1. Составим функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda_1) = x_1 + x_2 + \lambda_1\left(x_1^2 + x_2^2 - 2\right).$$

2. Выпишем необходимые условия экстремума первого порядка:

а) $$\frac{\partial L(x, \lambda_1)}{\partial x_1} = 1 + 2\lambda_1 x_1 = 0 \;\Rightarrow\; x_1 = -\frac{1}{2\lambda_1},$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda_1)}{\partial x_2} = 1 + 2\lambda_1 x_2 = 0 \;\Rightarrow\; x_2 = -\frac{1}{2\lambda_1};$$

б) $g_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$.

3. Решением системы являются две условно-стационарные точки:

$$A\colon\; x_1^* = 1,\; x_2^* = 1,\; \lambda_1^* = -\frac{1}{2}; \qquad B\colon\; x_1^* = -1,\; x_2^* = -1,\; \lambda_1^* = \frac{1}{2}.$$

4. Проверим выполнение достаточных условий экстремума:

а) $d^2 L(x^*, \lambda_1^*) = 2\lambda_1^* dx_1^2 + 2\lambda_1^* dx_2^2$, так как $\dfrac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_1^2} = \dfrac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_2^2} = 2\lambda_1^*$,

$$\frac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 L(x, \lambda_1)}{\partial x_2 \partial x_1} = 0;$$

б) $dg_1(x^*) = 2x_1^* dx_1 + 2x_2^* dx_2 = 0$, так как $\dfrac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} = 2x_1$, $\dfrac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} = 2x_2$;

в) исследуем точку *A*. Получаем $dg_1(A) = 2dx_1 + 2dx_2 = 0$, откуда $dx_1 = -dx_2$. С учетом полученного соотношения $d^2 L(A) = -dx_1^2 - dx_2^2 = -2dx_2^2 < 0$ при $dx_2 \neq 0$. Поэтому в точке $x^* = (1,1)^T$ – регулярный условный локальный максимум.

Исследуем точку B. Получаем $dg_1(B) = -2dx_1 - 2dx_2 = 0$, откуда $dx_1 = -dx_2$. С учетом полученного соотношения $d^2L(B) = dx_1^2 + dx_2^2 = 2dx_2^2 > 0$ при $dx_2 \neq 0$. Поэтому в точке $x^* = (-1, -1)^T$ – регулярный условный локальный минимум.

5. Подсчитаем значения функции в точках экстремума: $f(A) = 2, f(B) = -2$. Графическое решение задачи изображено на рис. 2. ■

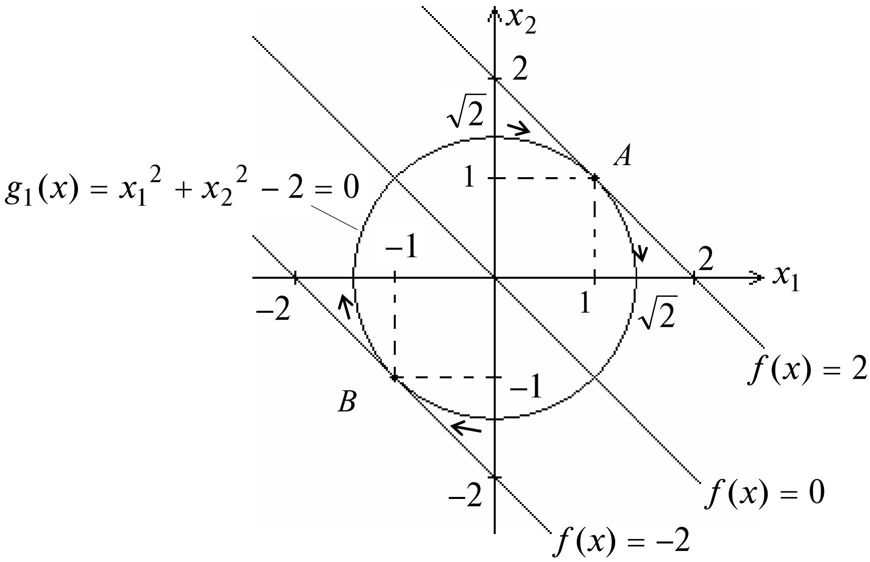


Рис. 2

Б. ОГРАНИЧЕНИЯ ТИПА НЕРАВЕНСТВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f(x_1, \ldots, x_n)$ и функции ограничений $g_j(x) = g_j(x_1, \ldots, x_n) \le 0$, $j = 1, \ldots, m$, определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x); \qquad f(x^*) = \max_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; g_j(x) \le 0,\ j = 1, \ldots, m \right\}$.

Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Составить обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x, \lambda_0, \lambda) = \lambda_0 f(x) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \, g_j(x).$$

Шаг 2. Записать необходимые условия минимума (максимума) первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x^*,\lambda_0^*,\lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1,\dots,n$;

б) $g_j(x^*) \le 0$, $j = 1,\dots,m$;

в) $\lambda_j^* \ge 0$, $j = 1,\dots,m$ (для минимума), $\lambda_j^* \le 0$, $j = 1,\dots,m$ (для максимума);

г) $\lambda_j^* \; g_j(x^*) = 0$, $j = 1,\dots,m$.

Шаг 3. Решить систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0^* = 0$.

Второй случай: $\lambda_0^* \ne 0$ (при этом поделить условия, записанные на шаге 2, на λ_0^* и заменить $\dfrac{\lambda_j^*}{\lambda_0^*}$ на λ_j^*).

В результате решения найти условно-стационарные точки x^*, выделив из них полученные при $\lambda_0^* \ne 0$ (они могут быть регулярными точками экстремума). В каждом из двух случаев следует начинать с рассмотрения 2^m вариантов удовлетворения условия «г» дополняющей нежесткости.

Шаг 4. Для выделенных на шаге 3 точек проверить выполнение достаточных условий экстремума первого или второго порядка.

Для проверки выполнения достаточных условий первого порядка следует:

а) определить число l активных в точке x^* ограничений;

б) если $l = n$ и $\lambda_j^* > 0$ для всех $j \in J_a$, то в точке x^* – условный локальный минимум. Если $l = n$ и $\lambda_j^* < 0$ для всех $j \in J_a$, то в точке x^* – условный локальный максимум. Если $l < n$ или соответствующие множители Лагранжа не удовлетворяют достаточным условиям первого порядка, проверить достаточные условия второго порядка.

Для проверки выполнения достаточных условий второго порядка следует:

а) записать выражение для второго дифференциала классической функции Лагранжа в точке (x^*,λ^*):

$$d^2L(x^*,\lambda^*) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 L(x^*,\lambda^*)}{\partial x_i \partial x_j}\, dx_i\, dx_j\,;$$

б) записать условия, накладываемые на первые дифференциалы активных ограничений:

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i}\, dx_i = 0, \quad j \in J_a; \quad \lambda_j^* > 0 \;\; (\lambda_j^* < 0);$$

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i}\, dx_i \le 0, \quad j \in J_a, \;\; \lambda_j^* = 0;$$

в) исследовать знак второго дифференциала функции Лагранжа при ненулевых dx, удовлетворяющих системе, составленной в п.б. Если $d^2L(x^*,\lambda^*) > 0$, то в точке x^* – условный локальный минимум. Если $d^2L(x^*,\lambda^*)<0$, то в точке x^* – условный локальный максимум.

Если достаточные условия первого и второго порядка не выполняются, следует проверить выполнение необходимых условий второго порядка (см. утверждение 3.6 – лекция 2), следуя аналогичной процедуре. Если они выполняются, то требуется дополнительное исследование, а если нет, то в точке x^* нет условного экстремума.

Шаг 5. Вычислить значения функции в точках условного экстремума.

Пример 2. Найти условный минимум в задаче

$$f(x)=x_1^2+(x_2-2)^2\to\min,$$
$$g_1(x)=x_1^2+x_2^2-1\le 0,$$
$$g_2(x)=-x_1\le 0,$$
$$g_3(x)=-x_2\le 0.$$

□ 1. Составим обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x,\lambda_0,\lambda)=\lambda_0\left[x_1^2+(x_2-2)^2\right]+\lambda_1(x_1^2+x_2^2-1)+\lambda_2(-x_1)+\lambda_3(-x_2).$$

2. Выпишем необходимые условия минимума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x,\lambda_0,\lambda)}{\partial x_1}=2\lambda_0x_1+2\lambda_1x_1-\lambda_2=0$,

$\dfrac{\partial L(x,\lambda_0,\lambda)}{\partial x_2}=2\lambda_0(x_2-2)+2\lambda_1x_2-\lambda_3=0$;

б) $x_1^2+x_2^2-1\le 0$, $-x_1\le 0$, $-x_2\le 0$;

в) $\lambda_1\ge 0$, $\lambda_2\ge 0$, $\lambda_3\ge 0$;

г) $\lambda_1(x_1^2+x_2^2-1)=0$, $\lambda_2(-x_1)=0$, $\lambda_3(-x_2)=0$.

3. Решим систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0=0$, тогда условия “а” запишутся в виде

$$2\lambda_1x_1-\lambda_2=0,$$
$$2\lambda_1x_2-\lambda_3=0.$$

Рассмотрим восемь вариантов выполнения условий «г» дополняющей нежесткости:

1) $\lambda_1=0$, $\lambda_2=0$, $\lambda_3=0$, при этом не удовлетворяется требование утверждения 3.4;

2) $\lambda_1\ne 0$, $\lambda_2=0$, $\lambda_3=0$, тогда $x_1=x_2=0$ из условия «а», но первое условие дополняющей нежесткости не удовлетворяется;

3) $\lambda_1=0$, $\lambda_2\ne 0$, $\lambda_3=0$, тогда из первого уравнения в условии «а» имеем $\lambda_2=0$, т.е. имеется противоречие;

4) $\lambda_1=0$, $\lambda_2=0$, $\lambda_3\ne 0$, тогда из второго уравнения в условии «а» имеем $\lambda_3=0$, т.е. также имеется противоречие;

5) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 = 0$, тогда $x_1 = 0$ и из первого уравнения в условии «а» имеем $\lambda_2 = 0$, т.е. имеется противоречие;

6) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда $x_2 = 0$ и из второго уравнения в условии «а» имеем $\lambda_3 = 0$, т.е. также имеется противоречие;

7) $\lambda_1 = 0, \lambda_2 \neq 0, \lambda_3 \neq 0$, тогда не выполняются оба уравнения в условии “а”;

8) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда уравнения $x_1 = x_2 = 0$, $x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$, следующие из условия “г”, вместе не выполняются.

Условно-стационарных точек пока не найдено.

Второй случай: $\lambda_0 \neq 0$. Поделив уравнения приведенной в п.2 системы на λ_0 и заменив $\dfrac{\lambda_1}{\lambda_0}$ на λ_1, $\dfrac{\lambda_2}{\lambda_0}$ на λ_2, $\dfrac{\lambda_3}{\lambda_0}$ на λ_3, получим:

а) $\dfrac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x_1} = 2x_1 + 2\lambda_1 x_1 - \lambda_2 = 0$, $\quad \dfrac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x_2} = 2(x_2 - 2) + 2\lambda_1 x_2 - \lambda_3 = 0$;

б) $x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0$, $\quad -x_1 \leq 0$, $\quad -x_2 \leq 0$;

в) $\lambda_1 \geq 0$, $\quad \lambda_2 \geq 0$, $\quad \lambda_3 \geq 0$;

г) $\lambda_1 (x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0$, $\quad \lambda_2(-x_1) = 0$, $\quad \lambda_3(-x_2) = 0$.

Рассмотрим восемь вариантов выполнения условий дополняющей нежесткости:

1) $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = 0$, тогда $x_1 = 0, x_2 = 2$ и не выполняется первое ограничение в условии «б»;

2) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = 0$, тогда

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0,$$
$$2x_1(1 + \lambda_1) = 0,$$
$$2(x_2 - 2) + 2\lambda_1 x_2 = 0.$$

Если $\lambda_1 = -1$, то третье уравнение не удовлетворяется. Если $x_1 = 0$, то $x_2 = \pm 1$. Ограничениям в условии «б» удовлетворяет $x_2 = 1$, при этом $\lambda_1 = 1$. Получили условно-стационарную точку A: $x_1^* = 0,\ x_2^* = 1,\ \lambda_1^* = 1,\ \lambda_2^* = 0,\ \lambda_3^* = 0$;

3) $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 = 0$, тогда

$$x_1 = 0,$$
$$2x_1 - \lambda_2 = 0,$$
$$2(x_2 - 2) = 0.$$

Получаем $\lambda_2 = 2x_1 = 0$, что противоречит условию $\lambda_2 \neq 0$;

4) $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда

$$x_2 = 0,$$
$$2x_1 = 0,$$
$$2(x_2 - 2) - \lambda_3 = 0.$$

Получаем $\lambda_3 = -4 < 0$, что противоречит условию «в»;

5) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 = 0$, тогда

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0,$$
$$x_1 = 0,$$
$$2x_1 + 2\lambda_1 x_1 - \lambda_2 = 0,$$

$$2(x_2-2)+2\lambda_1 x_2=0.$$

Из третьего соотношения следует, что $\lambda_2=0$, т.е. имеется противоречие;

6) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2=0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда

$$x_1^2+x_2^2-1=0,$$
$$x_2=0,$$
$$2x_1+2\lambda_1 x_1=0,$$
$$2(x_2-2)+2\lambda_1 x_2-\lambda_3=0.$$

Из последнего соотношения следует, что $\lambda_3=-4<0$. Это противоречит условию «в»;

7) $\lambda_1=0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда

$$x_1=x_2=0,$$
$$2x_1-\lambda_2=0,$$
$$2(x_2-2)-\lambda_3=0.$$

Из второго соотношения следует, что $\lambda_2=0$. Это противоречит условию $\lambda_2 \neq 0$;

8) $\lambda_1 \neq 0$, $\lambda_2 \neq 0$, $\lambda_3 \neq 0$, тогда $x_1^2+x_2^2-1=0$. Из условия «г» следует, что $x_1=0, x_2=0$. Эта система несовместна.

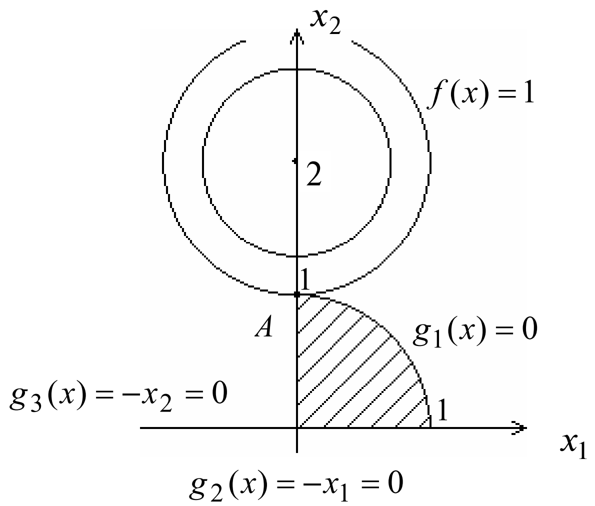


Рис. 3

4. Проверим выполнение достаточных условий минимума. В точке A имеются два активных ограничения, т.е. $l=2=n=2$ (рис. 3). Так как $\lambda_1^*=1>0$, $\lambda_2^*=0$, то достаточные условия минимума первого порядка не выполняются ввиду того, что требуется строгая положительность соответствующих множителей Лагранжа. Проверим условия второго порядка: $d^2L(A)=(2+2\lambda_1^*)dx_1^2+(2+2\lambda_1^*)dx_2^2$. Поскольку в точке два активных ограничения и для одного из них $\lambda_1^*>0$, а для другого $\lambda_2^*=0$, то применим условия:

$$dg_1(A)=2x_1^*\,dx_1+2x_2^*\,dx_2=2dx_2=0, \quad \lambda_1^*>0;$$
$$dg_2(A)=-dx_1 \le 0, \quad \lambda_2^*=0.$$

В результате $d^2L(A) = 4dx_1^2 > 0$ при $dx_1 \ge 0$ и $dx_1 \ne 0$. Поэтому в точке A – локальный условный минимум. С другой стороны, целевая функция и множество допустимых решений выпуклые. Поэтому в точке A достигается глобальный минимум.

5. Вычислим значение функции в точке глобального минимума: $f(A) = 1$. ■

В. СМЕШАННЫЕ ОГРАНИЧЕНИЯ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f(x_1,\ldots,x_n)$ и функции ограничений типа равенств и неравенств: $g_j(x) = 0$, $j = 1,\ldots,m$; $g_j(x) \le 0$, $j = m+1,\ldots,p$, определяющие множество допустимых решений X.

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

$$f(x^*) = \min_{x\in X} f(x); \quad f(x^*) = \max_{x\in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \left| \begin{array}{l} g_j(x) = 0,\ j = 1,\ldots,m;\ m < n \\ g_j(x) \le 0,\ j = m+1,\ldots,p \end{array} \right. \right\}$.

Алгоритм решения задачи

Шаг 1. Составить обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x,\lambda_0,\lambda) = \lambda_0 f(x) + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j g_j(x).$$

Шаг 2. Записать необходимые условия минимума (максимума) первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x^*,\lambda_0^*,\lambda^*)}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1,\ldots,n$;

б) $g_j(x^*) = 0$, $j = 1,\ldots,m$; $g_j(x^*) \le 0$, $j = m+1,\ldots,p$;

в) $\lambda_j^* \ge 0$, $j = m+1,\ldots,p$ (для минимума),

$\lambda_j^* \le 0$, $j = m+1,\ldots,p$ (для максимума);

г) $\lambda_j^*\, g_j(x^*) = 0$, $j = m+1,\ldots,p$.

Шаг 3. Решить систему для двух случаев:

Первый случай: $\lambda_0^* = 0$.

Второй случай: $\lambda_0^* \ne 0$ (при этом поделить условия «а», «в», «г» на λ_0^* и заменить $\dfrac{\lambda_j^*}{\lambda_0^*}$ на λ_j^*).

В результате найти условно-стационарные точки x^*, выделив из них полученные при $\lambda_0^* \ne 0$ (они могут быть регулярными точками экстремума). В каждом из двух случаев следует начинать с рассмотрения 2^{p-m} вариантов удовлетворения условия «г» дополняющей нежесткости.

Шаг 4. Для выделенных на шаге 3 точек проверить выполнение достаточных условий экстремума первого или второго порядка.

Для проверки достаточных условий первого порядка следует:

а) определить число l ограничений-равенств и активных ограничений-неравенств;

б) если $l = n$ и $\lambda_j^* > 0$ для всех $j \in J_a$, т.е. для всех активных ограничений-неравенств, то в точке x^* – локальный минимум. Если $l = n$ и $\lambda_j^* < 0$ для всех $j \in J_a$, то в точке x^*– локальный максимум. Если $l < n$ или соответствующие множители Лагранжа не удовлетворяют достаточным условиям первого порядка, проверить достаточные условия второго порядка.

Для проверки достаточных условий второго порядка следует:

а) записать выражение для второго дифференциала классической функции Лагранжа в точке (x^*, λ^*): $d^2L(x^*,\lambda^*) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 L(x^*,\lambda^*)}{\partial x_i \partial x_j} dx_i\, dx_j$;

б) записать условия, накладываемые на первые дифференциалы ограничений-равенств и активных в точке x^* ограничений-неравенств:

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i} dx_i = 0,\ j = 1,\ldots,m \quad \text{и} \quad j \in J_a;\ \lambda_j^* > 0\ (\lambda_j^* < 0);$$

$$dg_j(x^*) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g_j(x^*)}{\partial x_i} dx_i \le 0,\ j \in J_a,\ \lambda_j^* = 0;$$

в) исследовать знак второго дифференциала функции Лагранжа для ненулевых dx, удовлетворяющих системе из п.б. Если $d^2L(x^*,\lambda^*) > 0$, то в точке x^* – условный локальный минимум. Если $d^2L(x^*,\lambda^*) < 0$, то в точке x^* – условный локальный максимум. Если достаточные условия экстремума не выполняются, следует проверить выполнение необходимых условий второго порядка (см. утверждение 3.10 – лекция 2), следуя аналогичной процедуре. Если они выполняются, то требуется дополнительное исследование, а если нет, то в точке x^* нет условного экстремума.

Шаг 5. Вычислить значения функции в точках условного экстремума.

Пример 3. Найти условный экстремум в задаче

$$f(x) = x_1 - x_2^2 \to \text{extr},$$

$$g_1(x) = x_1 - x_2 - 1 = 0,$$

$$g_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0.$$

☐ 1. Составим обобщенную функцию Лагранжа:

$$L(x,\lambda_0,\lambda) = \lambda_0 (x_1 - x_2^2) + \lambda_1 (x_1 - x_2 - 1) + \lambda_2 (x_1^2 + x_2^2 - 5).$$

2. Выпишем необходимые условия минимума и максимума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x,\lambda_0,\lambda)}{\partial x_1} = \lambda_0 + \lambda_1 + 2\lambda_2 x_1 = 0$, $\dfrac{\partial L(x,\lambda_0,\lambda)}{\partial x_2} = -2\lambda_0 x_2 - \lambda_1 + 2\lambda_2 x_2 = 0$;

б) $x_1 - x_2 - 1 = 0$, $x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0$;

в) $\lambda_2 \ge 0$ (для минимума), $\lambda_2 \le 0$ (для максимума);

г) $\lambda_2\ (x_1^2 + x_2^2 - 5) = 0$.

3. Решим систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0 = 0$, тогда условие «а» имеет вид

$$\lambda_1 + 2\lambda_2 x_1 = 0,$$
$$-\lambda_1 + 2\lambda_2 x_2 = 0.$$

Рассмотрим два варианта удовлетворения условия «г»:

1) $\lambda_2 = 0$, тогда $\lambda_1 = 0$ и не удовлетворяется условие утверждения 3.8;

2) $\lambda_2 \ne 0$, тогда система уравнений

$$x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0,$$
$$x_1 - x_2 - 1 = 0$$

удовлетворяется в двух точках: $x_1 = 2, x_2 = 1$; $x_1 = -1, x_2 = -2$. Складывая два уравнения в условии «а», получаем $2\lambda_2(x_1 + x_2) = 0$. Так как $\lambda_2 \ne 0$, то $x_1 = -x_2$, что не удовлетворяется в обеих найденных точках.

Второй случай: $\lambda_0 \ne 0$. Поделив уравнения приведенной в п.2 системы на λ_0 и заменив $\frac{\lambda_1}{\lambda_0}$ на λ_1, $\frac{\lambda_2}{\lambda_0}$ на λ_2, запишем условие «а» в виде

$$\frac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x_1} = 1 + \lambda_1 + 2\lambda_2 x_1 = 0, \quad \frac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x_2} = -2x_2 - \lambda_1 + 2\lambda_2 x_2 = 0.$$

Остальные условия сохраняют вид.

Рассмотрим два варианта удовлетворения условия «г»:

1) $\lambda_2 = 0$, тогда

$$1 + \lambda_1 = 0,$$
$$-2x_2 - \lambda_1 = 0,$$
$$x_1 - x_2 - 1 = 0.$$

Отсюда имеем $\lambda_1 = -1$, $x_2 = \frac{1}{2}$, $x_1 = \frac{3}{2}$. В результате получили условно-стационарную точку A: $x_1^* = \frac{3}{2}$, $x_2^* = \frac{1}{2}$, $\lambda_1^* = -1$, $\lambda_2^* = 0$, в которой удовлетворяется необходимое условие и минимума, и максимума;

2) $\lambda_2 \ne 0$, тогда

$$x_1^2 + x_2^2 - 5 = 0,$$
$$x_1 - x_2 - 1 = 0,$$
$$1 + \lambda_1 + 2\lambda_2 x_1 = 0,$$
$$-2x_2 - \lambda_1 + 2\lambda_2 x_2 = 0.$$

Получаем еще две условно-стационарные точки:

$$B:\ x_1^* = 2,\ x_2^* = 1,\ \lambda_1^* = -\frac{5}{3},\ \lambda_2^* = \frac{1}{6} > 0; \qquad C:\ x_1^* = -1,\ x_2^* = -2,\ \lambda_1^* = \frac{2}{3},\ \lambda_2^* = \frac{5}{6} > 0,$$

в которых удовлетворяются необходимые условия минимума.

4. Проверим выполнение достаточных условий экстремума первого порядка.

В точке A ограничение-неравенство не является активным, поэтому $l = 1 < n = 2$ и условия не выполняются. В точках B и C ограничение-неравенство активное, поэтому $l = n = 2$. В обеих точках $\lambda_2^* > 0$, поэтому в них достигается условный локальный минимум.

Проверим достаточные условия экстремума второго порядка из методических соображений (в точке A это требуется обязательно).

В точке A ограничение-неравенство не является активным:

$$d^2 L(A) = 2\lambda_2^*\, dx_1^2 + \left(2\lambda_2^* - 2\right) dx_2^2 = -2dx_2^2 ,$$

$$dg_1(A) = dx_1 - dx_2 = 0 .$$

Отсюда имеем: $dx_1 = dx_2$ и $d^2 L(A) = -2dx_1^2 < 0$ при $dx_1 \neq 0$. Поэтому в точке A – локальный условный максимум.

В точках B и C ограничение-неравенство активно.

$$d^2 L(B) = \frac{1}{3} dx_1^2 - \frac{5}{3} dx_2^2 ,$$

Исследуем точку B: $\quad dg_1(B) = dx_1 - dx_2 = 0,$

$$dg_2(B) = 2x_1^* dx_1 + 2x_2^* dx_2 = 4dx_1 + 2dx_2 = 0 .$$

Отсюда следует, что $dx_1 = dx_2 = 0$ и $d^2 L(B) \equiv 0$, поэтому требуется дополнительное исследование.

$$d^2 L(C) = \frac{5}{3} dx_1^2 - \frac{1}{3} dx_2^2 ,$$

Исследуем точку C: $\quad dg_1(C) = dx_1 - dx_2 = 0,$

$$dg_2(C) = -2dx_1 - 4dx_2 = 0 .$$

Отсюда имеем: $dx_1 = dx_2 = 0$ и $d^2 L(C) \equiv 0$. Требуется дополнительное исследование.

Из рис. 4 следует, что в точке B – условный локальный минимум, а в точке C – условный глобальный минимум.

5. Значения функции в точках экстремума: $f(A) = \frac{5}{4}, f(B) = 1, f(C) = -5$. ■

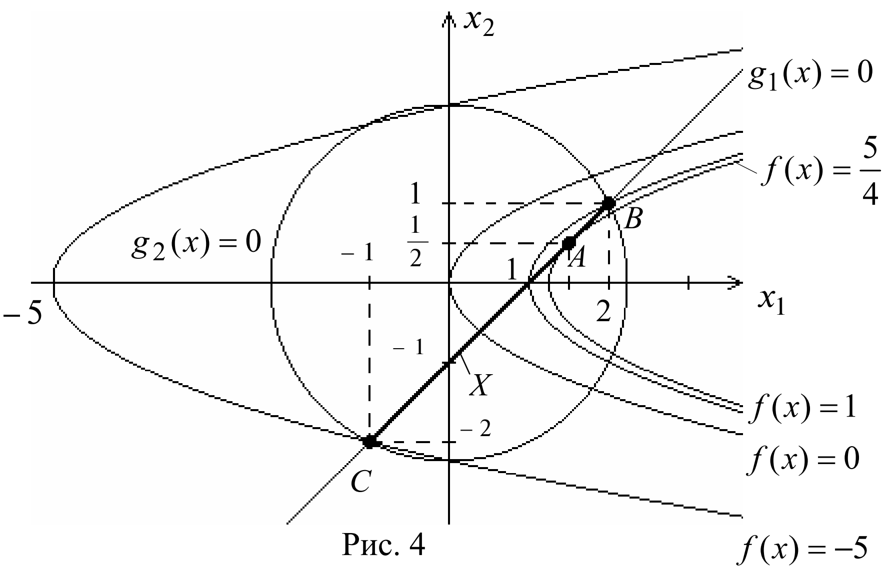


Рис. 4

Занятие 3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА. МЕТОДЫ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

Постановка задачи

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

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

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

А. МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА С ПОСТОЯННЫМ ШАГОМ

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

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

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

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

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

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

Шаг 6. Задать величину шага t_k.

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

Шаг 8. Проверить выполнение условия

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

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

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

Шаг 9. Проверить выполнение условий

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

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

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

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

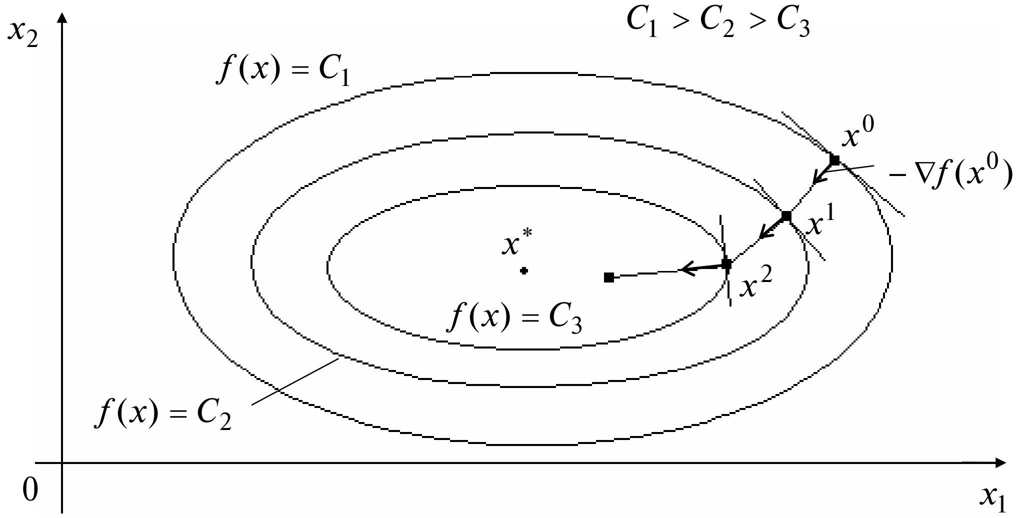


Рис. 1

Пример 1. Найти локальный минимум функции

$$f(x) = 2x_1^{\,2} + x_1 x_2 + x_2^{\,2}.$$

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

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

2. Положим $k = 0$.

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

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

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

6^0. Зададим $t_0 = 0{,}5$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

6^1. Зададим $t_1 = 0{,}25$.

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

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

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

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

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

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

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

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

6^2. Зададим $t_2 = 0{,}25$.

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

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

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

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

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

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

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

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

6^3. Зададим $t_3 = 0{,}25$.

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

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

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

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

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

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

Б. МЕТОД НАИСКОРЕЙШЕГО ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

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

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

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

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

Шаг 6. Вычислить величину шага t_k^* из условия

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

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

Шаг 8. Проверить выполнение условий

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

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

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

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

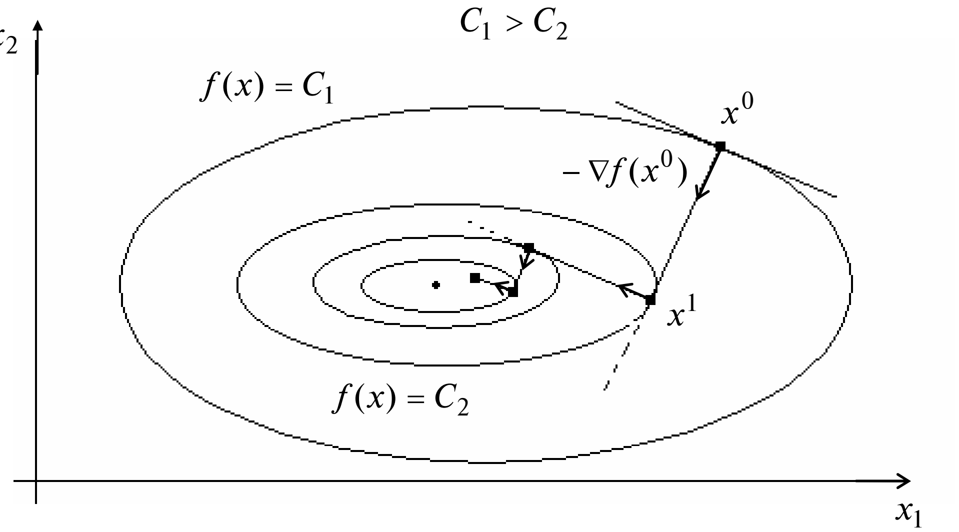


Рис. 2

Пример 2. Найти локальный минимум функции

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

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

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

2. Положим $k = 0$.

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

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

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

6^0. Следующую точку найдем по формуле

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

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

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

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

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

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

Имеем

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

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

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

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

Определим t_0^*: $t_0^* = 0{,}24$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

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

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 3.

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

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

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

В. МЕТОД ГАУССА–ЗЕЙДЕЛЯ

Алгоритм

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

Шаг 2. Задать номер цикла $j = 0$.

Шаг 3. Проверить условие $j \geq M$:

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

б) если $j < M$, то перейти к шагу 4.

Шаг 4. Задать $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

б) если нет, то перейти к шагу 8.

Шаг 8. Вычислить t_k^* из условия

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

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

Шаг 10. Проверить выполнение условий

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

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

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

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

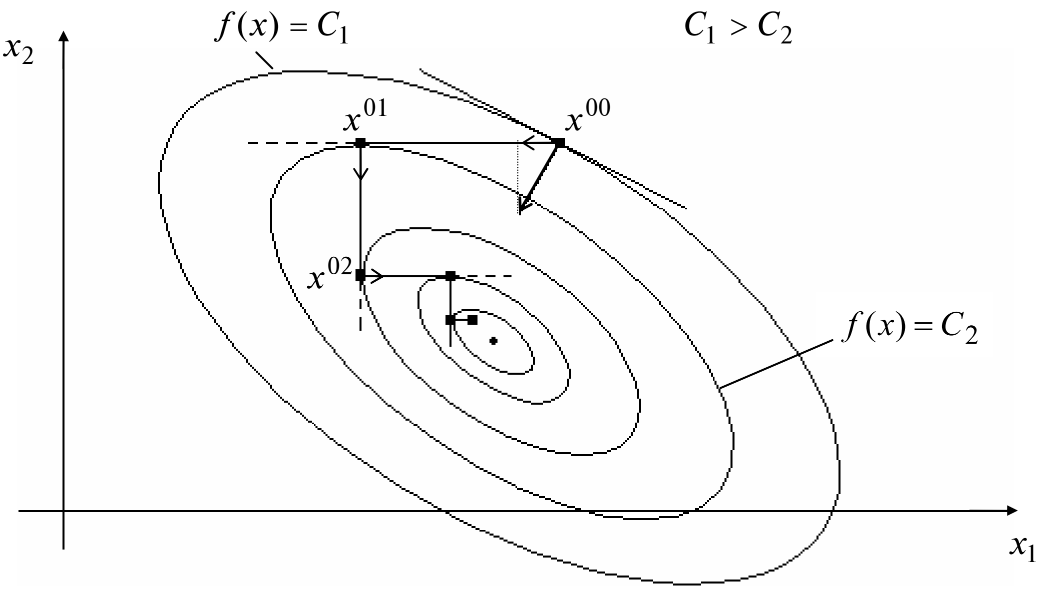


Рис. 3

Пример 3. Найти локальный минимум функции

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

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

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

2. Зададим $j = 0$.

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

4^0. Зададим $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 5.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Из необходимого условия экстремума

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 5.

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

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

4^1. Зададим $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 5.

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 5.

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

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

4^2. Зададим $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Занятие 4. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА БЕЗУСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА. МЕТОДЫ ПЕРВОГО И ВТОРОГО ПОРЯДКА (*продолжение занятия* 3)

Г. МЕТОД ФЛЕТЧЕРА–РИВСА

Постановка задачи

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

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

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

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

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

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

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

Шаг 5. Проверить условие $k \ge M$:

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

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

Шаг 7. Определить

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

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

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

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

Шаг 11. Проверить выполнение условий

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

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

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

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

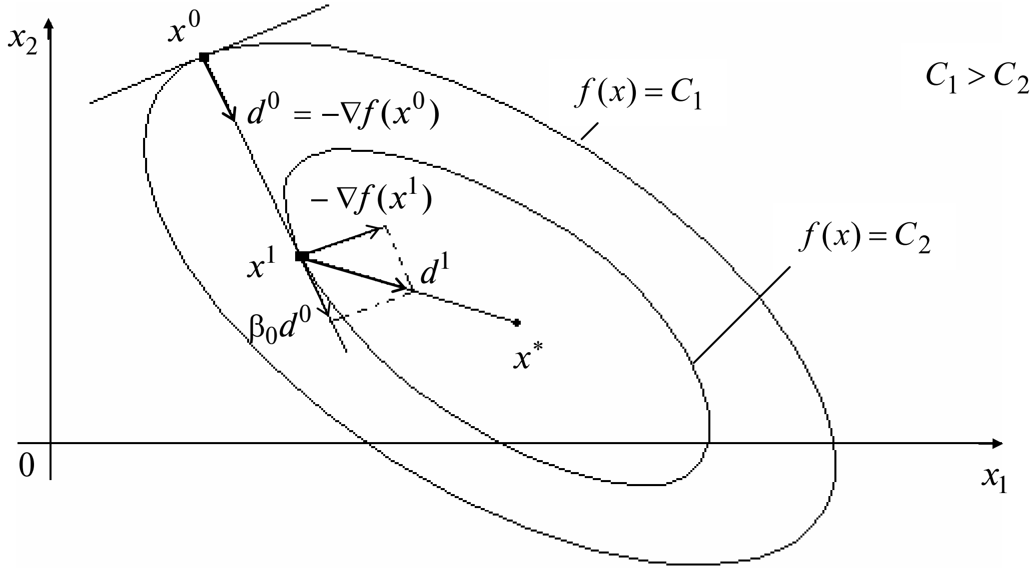


Рис. 4

Пример 4. Найти локальный минимум функции

$$f(x) = 2x_1^{\,2} + x_1 x_2 + x_2^{\,2}.$$

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

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

2. Положим $k = 0$.

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

4^0. Проверим условие $\left\| \nabla f(x^0) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f(x^0) \right\| = 3{,}9 > 0{,}1$.

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

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

4^1. Проверим условие $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| < \varepsilon_1$: $\left\| \nabla f\left(x^1\right) \right\| = 0{,}752 > 0{,}1$.

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

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

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

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

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

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

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

Применяя необходимое условие безусловного экстремума

$$\frac{d\varphi(t_1)}{dt_1} = 4 \cdot (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1) \cdot 0{,}368 + 0{,}368 \cdot (0{,}4 - 0{,}673\, t_1) +$$
$$+ (-0{,}22 + 0{,}368\, t_1) \cdot (-0{,}673) + 2 \cdot (0{,}4 - 0{,}673\, t_1) \cdot (-0{,}673) = 0 ,$$

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

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

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

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

Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

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

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

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

МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

А. МЕТОД НЬЮТОНА

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Шаг 10. Найти точку $x^{k+1} = x^k + t_k\, d^k$,
положив $t_k = 1$, если $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$,
или выбрав t_k из условия $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, если $d^k = -\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий

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

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

Пример 5. Найти локальный минимум функции

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

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

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

2. Положим $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Б. МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Шаг 12. Проверить выполнение неравенств

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

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

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

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

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

2. Положим $k = 0$.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

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

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

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

Занятие 5. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ПОИСКА УСЛОВНОГО ЭКСТРЕМУМА

А. МЕТОД ШТРАФОВ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f(x_1, \ldots, x_n)$ и функции ограничений $g_j(x) = 0$, $j = 1, \ldots, m$; $g_j(x) \le 0$, $j = m+1, \ldots, p$, определяющие множество допустимых решений *X*.

Требуется найти локальный минимум целевой функции на множестве X, т.е. такую точку $x^* \in X$, что

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \;\middle|\; \begin{array}{ll} g_j(x) = 0, & j = 1, \ldots, m; \quad m < n \\ g_j(x) \le 0, & j = m+1, \ldots, p \end{array} \right\}.$

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x^0, начальное значение параметра штрафа $r^0 > 0$, число $C > 1$ для увеличения параметра, малое число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Составить вспомогательную функцию

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) + \frac{r^k}{2} \left\{ \sum_{j=1}^{m} [g_j(x)]^2 + \sum_{j=m+1}^{p} [g_j^+(x)]^2 \right\}.$$

Шаг 3. Найти точку $x^*(r^k)$ безусловного минимума функции $F\left(x, r^k\right)$ по x с помощью какого-либо метода (нулевого, первого или второго порядка):

$$F\left(x^*(r^k), r^k\right) = \min_{x \in R^n} F\left(x, r^k\right).$$

При этом задать все требуемые выбранным методом параметры. В качестве начальной точки взять x^k. Вычислить $P\left(x^*(r^k), r^k\right)$.

Шаг 4. Проверить условие окончания:

а) если $P\left(x^*(r^k), r^k\right) \le \varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^* = x^*(r^k), \qquad f(x^*) = f\left(x^*(r^k)\right);$$

б) если $P\left(x^*(r^k), r^k\right) > \varepsilon$, положить: $r^{k+1} = C r^k$, $x^{k+1} = x^*(r^k)$, $k = k+1$ и перейти к шагу 2.

Пример 1. Найти условный минимум в задаче

$$f(x) = x^2 - 4x \to \min,$$
$$g_1(x) = x - 1 \le 0.$$

□ 1. В поставленной задаче $m = 0$ (ограничения-равенства отсутствуют), $p = 1$. Решим задачу аналитически при произвольном параметре штрафа r^k, а затем получим решение последовательности задач поиска безусловного минимума.

2. Составим вспомогательную функцию:

$$F\left(x, r^k\right) = x^2 - 4x + \frac{r^k}{2}[\max\{0, (x-1)\}]^2.$$

3. Найдем безусловный минимум функции $F\left(x, r^k\right)$ по x с помощью необходимых и достаточных условий (см. гл. 2 – лекция 1):

$$\frac{\partial F\left(x, r^k\right)}{\partial x} = \begin{cases} 2x - 4 = 0, & x - 1 \le 0, \\ 2x - 4 + r^k(x-1) = 0, & x - 1 > 0. \end{cases}$$

Отсюда $x^* = 2$, но при этом не удовлетворяется условие $x^* - 1 \le 0$, а также

$$x^*(r^k) = \frac{4 + r^k}{2 + r^k}.$$

В табл. 1 приведены результаты расчетов при $r^k = 1, 2, 10, 100, 1000, \infty$, а на рис. 1 дана графическая иллюстрация процесса поиска решения.

Таблица 1

k	r^k	$x^*(r^k)$	$F\left(x^*(r^k), r^k\right)$
0	1	$\frac{5}{3}$	–3,66
1	2	$\frac{3}{2} = 1{,}5$	–3,5
2	10	$\frac{7}{6} = 1{,}1666$	–3,166
3	100	$\frac{52}{51} = 1{,}0196$	–3,019
4	1000	$\frac{502}{501} = 1{,}00199$	–3,002
5	∞	1	–3

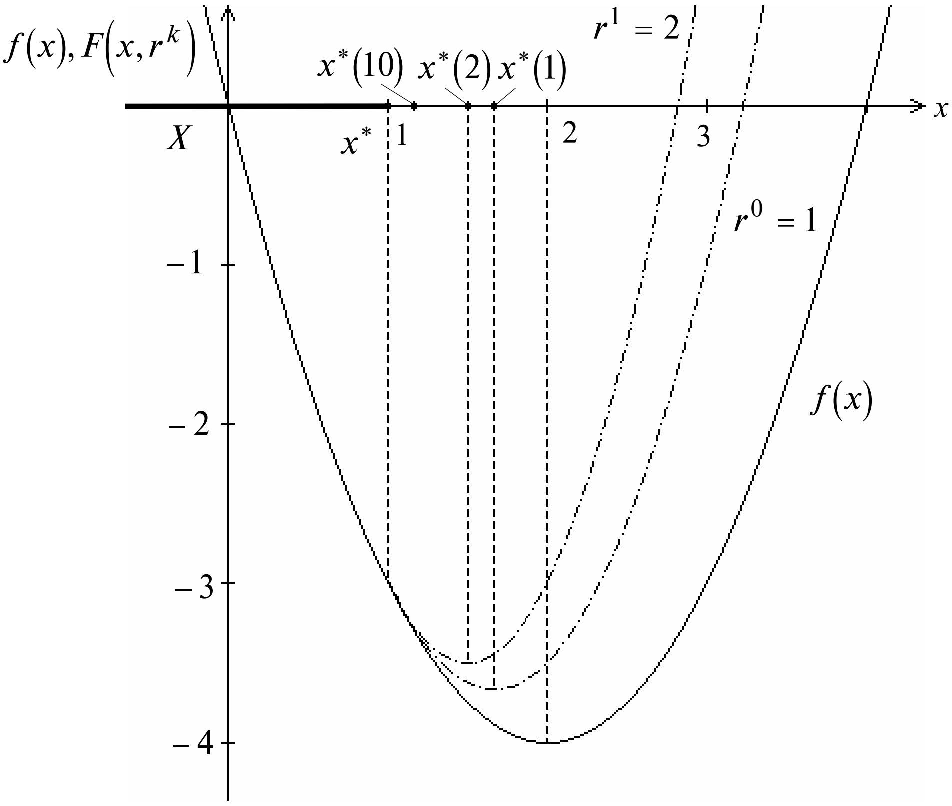


Рис. 1

Так как $\dfrac{\partial^2 F\left(x^*(r^k), r^k\right)}{\partial x^2} = 2 + r^k > 0$ при $r^k \geq 0$, то достаточные условия минимума $F\left(x, r^k\right)$ удовлетворяются. При $r^k \to \infty$ имеем

$$x^* = \lim_{r^k \to \infty} \frac{4 + r^k}{2 + r^k} = 1, \qquad f(x^*) = -3.$$

Найдем решение этой задачи с применением необходимых и достаточных условий экстремума. Функция Лагранжа имеет вид

$$L(x, \lambda_0, \lambda_1) = \lambda_0\left(x^2 - 4x\right) + \lambda_1(x - 1).$$

Необходимые условия минимума первого порядка:

а) $\dfrac{\partial L(x, \lambda_0, \lambda_1)}{\partial x} = \lambda_0(2x - 4) + \lambda_1 = 0$;

б) $x - 1 \leq 0$;

в) $\lambda_1 \geq 0$;

г) $\lambda_1(x - 1) = 0$.

Решим систему для двух случаев.

Первый случай: $\lambda_0 = 0$, тогда из условия «а» получаем $\lambda_1 = 0$, что не удовлетворяет утверждению.

Второй случай: $\lambda_0 \neq 0$. Поделив уравнения системы на λ_0 и заменив $\frac{\lambda_1}{\lambda_0}$ на λ_1, получим $2x - 4 + \lambda_1 = 0$. Из условия «г» имеем $\lambda_1 = 0$ или $x = 1$. При $\lambda_1 = 0$ из условия «а» следует, что $x = 2$, но при этом не удовлетворяется условие «б». При $x^* = 1$ имеем $\lambda_1^* = 2$.

Достаточные условия минимума первого порядка удовлетворяются, так как $\lambda_1^* = 2 > 0$ и число активных ограничений $l = 1 = n$. ■

Пример 2. Найти условный минимум в задаче

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \min,$$
$$g_1(x) = x_1 + x_2 - 2 = 0.$$

□ 1. В поставленной задаче $m = 1$, ограничения-неравенства отсутствуют. Решим ее аналитически.

2. Составим вспомогательную функцию:

$$F\left(x, r^k\right) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{r^k}{2}(x_1 + x_2 - 2)^2.$$

3. Найдем безусловный минимум $F\left(x, r^k\right)$ по x с помощью необходимых и достаточных условий:

$$\frac{\partial F\left(x, r^k\right)}{\partial x_1} = 2x_1 + r^k(x_1 + x_2 - 2) = 0,$$
$$\frac{\partial F\left(x, r^k\right)}{\partial x_2} = 2x_2 + r^k(x_1 + x_2 - 2) = 0.$$

Вычитая из первого уравнения второе, получаем $x_1 = x_2$ и $x_1^*(r^k) = x_2^*(r^k) = \frac{r^k}{1 + r^k}$.

В табл. 2 приведены результаты расчетов при $r^k = 1, 2, 10, 100, 1000, \infty$, а на рис. 2 дана графическая иллюстрация процесса поиска решения.

Таблица 2

k	r^k	$x_1^*(r^k) = x_2^*(r^k)$	$F\left(x^*(r^k), r^k\right)$
0	1	$\frac{1}{2}$	1
1	2	$\frac{2}{3}$	1,333
2	10	$\frac{10}{11}$	1,81
3	100	$\frac{100}{101}$	1,98
4	1000	$\frac{1000}{1001}$	1,998
5	∞	1	2

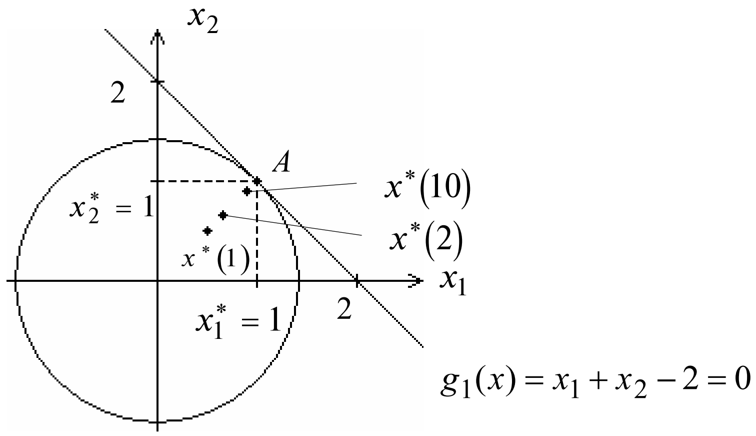


Рис. 2

Так как матрица Гессе $H\left(x^*(r^k), r^k\right) = \begin{pmatrix} 2+r^k & r^k \\ r^k & 2+r^k \end{pmatrix} > 0$ при $r^k > 0$, то достаточные условия безусловного минимума $F\left(x, r^k\right)$ удовлетворяются. При $r^k \to \infty$ имеем $\lim\limits_{r^k \to \infty} \dfrac{r^k}{1+r^k} = 1 = x_1^* = x_2^*$; $f(x^*) = 2$. ■

Пример 3. Найти условный минимум в задаче

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 \to \min,$$
$$g_1(x) = x_1 - 1 = 0,$$
$$g_2(x) = x_1 + x_2 - 2 \le 0.$$

□ 1. В задаче $m = 1, p = 2$. Решим ее аналитически.

2. Составим вспомогательную функцию:

$$F\left(x, r^k\right) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{r^k}{2}\left\{[x_1 - 1]^2 + [\,\max\{0, (x_1 + x_2 - 2)\}\,]^2\right\}.$$

3. Найдем безусловный минимум $F\left(x, r^k\right)$ по x с помощью необходимых и достаточных условий:

$$\frac{\partial F\left(x, r^k\right)}{\partial x_1} = 0 = \begin{cases} 2x_1 + r^k(x_1 - 1) + r^k(x_1 + x_2 - 2), & x_1 + x_2 - 2 > 0, \\ 2x_1 + r^k(x_1 - 1), & x_1 + x_2 - 2 \le 0, \end{cases}$$
$$\frac{\partial F\left(x, r^k\right)}{\partial x_2} = 0 = \begin{cases} 2x_2 + r^k(x_1 + x_2 - 2), & x_1 + x_2 - 2 > 0, \\ 2x_2, & x_1 + x_2 - 2 \le 0. \end{cases}$$

Рассмотрим два случая.

1. Пусть $x_1 + x_2 - 2 > 0$. Вычитая из первого уравнения второе, получаем

$$x_2 = x_1 + \frac{r^k}{2}(x_1 - 1).$$

После подстановки в первое уравнение имеем

$$x_1^*(r^k) = \frac{(r^k)^2 + 6r^k}{(r^k)^2 + 6r^k + 4}, \qquad x_2^*(r^k) = \frac{(r^k)^2 + 4r^k}{(r^k)^2 + 6r^k + 4}.$$

Однако при всех $r^k > 0$ имеем $x_1^*(r^k) + x_2^*(r^k) - 2 = \dfrac{-2r^k - 8}{(r^k)^2 + 6r^k + 4} < 0$, что противоречит условию $x_1 + x_2 - 2 > 0$ для рассматриваемого случая.

2. Пусть $x_1 + x_2 - 2 \le 0$. Тогда $x_2^* = 0$, а $x_1^*(r^k) = \dfrac{r^k}{2 + r^k}$. В табл. 3 приведены результаты расчетов, а на рис. 3 дана графическая иллюстрация процесса поиска решения.

Так как матрица Гессе $H\left(x^*(r^k), r^k\right) = \begin{pmatrix} 2 + r^k & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} > 0$ при всех $r^k > 0$, то достаточные условия минимума $F\left(x, r^k\right)$ удовлетворяются. При $r^k \to \infty$ имеем $x_1^* = \lim\limits_{r^k \to \infty} \dfrac{r^k}{2 + r^k} = 1, \quad x_2^* = 0, \quad f(x^*) = 1$. ■

Таблица 3

k	r^k	$x_1^*(r^k)$	$x_2^*(r^k)$	$F\left(x^*(r^k), r^k\right)$
0	1	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{5}{9}$
1	2	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{3}{4}$
2	10	$\frac{5}{6}$	0	$\frac{35}{36}$
3	100	$\frac{50}{51}$	0	$\frac{2600}{2601}$
4	1000	$\frac{500}{501}$	0	$\frac{251000}{251001}$
5	∞	1	0	1

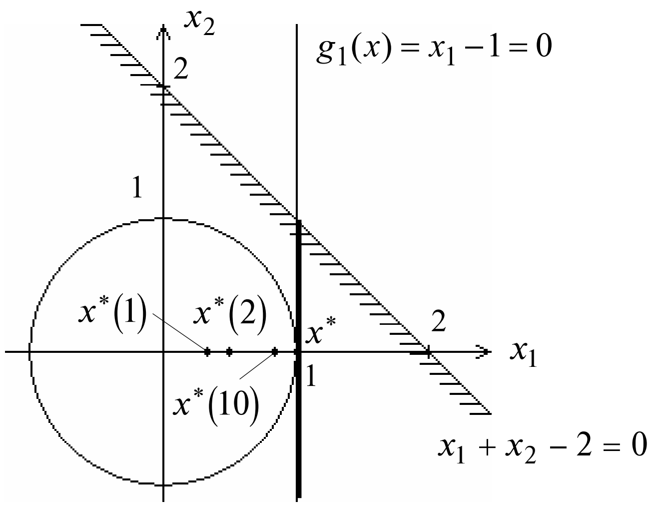


Рис. 3

Б. МЕТОД БАРЬЕРНЫХ ФУНКЦИЙ

Постановка задачи

Даны дважды непрерывно дифференцируемые целевая функция $f(x) = f\left(x_1,\ldots,x_n\right)$ и функции ограничений-неравенств $g_j(x) \le 0$, $j = 1,\ldots,m$, определяющие множество допустимых решений *X*.

Требуется найти локальный минимум целевой функции на множестве *X*, т.е. такую точку $x^* \in X$, что

$$f(x^*) = \min_{x \in X} f(x),$$

где $X = \left\{ x \mid g_j(x) \le 0,\ j = 1,\ldots,m \right\}$.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальную точку x^0 внутри области *X*, начальное значение параметра штрафа $r^k \ge 0$, число $C > 1$ для уменьшения параметра штрафа, малое число $\varepsilon > 0$ для остановки алгоритма. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Составить вспомогательную функцию:

$$F\left(x, r^k\right) = f(x) - r^k \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{g_j(x)} \quad \text{или} \quad F\left(x, r^k\right) = f(x) - r^k \sum_{j=1}^{m} \ln\left[-g_j(x)\right].$$

Шаг 3. Найти точку $x^*(r^k)$ минимума функции $F\left(x, r^k\right)$ с помощью какого-либо метода (нулевого, первого или второго порядка) поиска безусловного минимума с проверкой принадлежности текущей точки внутренности множества *X*. При этом задать все требуемые выбранным методом параметры. В качестве начальной точки взять x^k. Вычислить:

$$P\left(x^*(r^k),r^k\right)=-r^k\sum_{j=1}^{m}\frac{1}{g_j\left(x^*(r^k)\right)} \quad \text{или} \quad P\left(x^*(r^k),r^k\right)=-r^k\sum_{j=1}^{m}\ln\left[-g_j\left(x^*(r^k)\right)\right].$$

Шаг 4. Проверить выполнение условия окончания:

а) если $\left|P\left(x^*(r^k),r^k\right)\right|\le\varepsilon$, процесс поиска закончить:

$$x^*=x^*(r^k),\qquad f(x^*)=f\left(x^*(r^k)\right);$$

б) если $\left|P\left(x^*(r^k),r^k\right)\right|>\varepsilon$, положить $r^{k+1}=\dfrac{r^k}{C}$; $x^{k+1}=x^*(r^k)$, $k=k+1$ и перейти к шагу 2.

Замечания.

1. Обычно выбирается $r^0=1,10,100$, а параметр $C=10;12;16$.

2. При $r^k\to+0$ обеспечивается сходимость, однако с уменьшением r^k функция $F\left(x,r^k\right)$ становится все более «овражной». Поэтому полагать r^k малым числом сразу нецелесообразно.

Пример 4. Найти условный минимум в задаче

$$f(x)=x\to\min,$$
$$g_1(x)=2-x\le 0.$$

☐ 1. Найдем решение аналитически с применением обратной штрафной функции.

2. Составим вспомогательную функцию: $F\left(x,r^k\right)=x\underbrace{-r^k\frac{1}{2-x}}_{P(x,r^k)}$.

3. Найдем безусловный минимум $F\left(x,r^k\right)$ с помощью необходимых и достаточных условий: $\dfrac{\partial F\left(x,r^k\right)}{\partial x}=1-\dfrac{r^k}{(2-x)^2}=0$. Так как внутри множества допустимых решений $2-x<0$, то $x=2\pm\sqrt{r^k}$, а $x^*(r^k)=2+\sqrt{r^k}$ (результаты приведены в табл.4). Достаточные условия минимума выполняются:

$$\frac{\partial^2F\left(x^*(r^k),r^k\right)}{\partial x^2}=-\frac{r^k}{\left[2-x^*(r^k)\right]^3}>0.$$

Таблица 4

k	r^k	$x^*(r^k)$	$F\left(x^*(r^k),r^k\right)$	$P\left(x^*(r^k),r^k\right)$
0	1	3	4	1
1	0,1	2,31	2,63	0,32
2	0,01	2,1	2,2	0,1
3	0,001	2,03	2,063	0,033
4	0	2	2	-

Занятие 6. ЗАДАЧИ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ. РЕШЕНИЕ КАНОНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

А. СИМПЛЕКС-МЕТОД ДАНЦИГА

А1. Решение канонической задачи

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j\, x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j = b_i,\; i = 1,\ldots,m;\;\; m < n,$$

$$x_j \ge 0,\; j = 1,\ldots,n.$$

Задача называется *канонической*, а искомое решение $x^* = (x_1^*,\ldots,x_n^*)^T$ – *оптимальным*. Будем считать, что в ограничениях все числа $b_i \ge 0$, $i = 1,\ldots,m$. Этого можно добиться, умножая ограничения, где $b_i < 0$, на «-1».

Алгоритм решения канонической задачи

Шаг 1. Найти начальное базисное решение.

а) записать исходную каноническую задачу одним из двух способов:
- в форме, где для m переменных коэффициенты в уравнениях образуют единичную матрицу, используя преобразования Гаусса–Жордана;
- в расширенной форме с помощью перехода к M-задаче;

б) выделить базисные переменные (их можно подчеркнуть), входящие только в одно из уравнений системы с коэффициентами 1, а во все остальные с коэффициентами, равными нулю;

в) выделить свободные переменные (все остальные, кроме базисных);

г) найти начальное базисное решение, полагая свободные переменные равными нулю.

Шаг 2. Заполнить табл.1:

а) столбец базисных переменных (*БП*);

б) столбец базисного решения (*БР*);

в) строку c_j и столбец c_{i_B} коэффициентов функции. В столбец c_{i_B} записываются коэффициенты, соответствующие базисным переменным;

г) совокупность коэффициентов $\overline{a}_{ij}$ систем (над элементами поставлена черта для унификации обозначений, так как система преобразуется одним из двух способов).

Шаг 3. Вычислить относительные оценки

$$\Delta_j = c_j - \sum_{i=1}^{m} c_{i_B} \overline{a}_{ij} = c_j - z_j, \qquad z_j = \sum_{i=1}^{m} c_{i_B} \overline{a}_{ij}, \qquad j = 1,\ldots,m+n,$$

и записать их в таблицу. Заметим, что для базисных переменных оценки равны нулю. Этот факт можно использовать как для проверки правильности заполнения таблицы, так и для сокращения вычислений.

Шаг 4. Проанализировать относительные оценки:

а) если все оценки Δ_j неположительны, т.е.

$$\Delta_j \le 0, \qquad j = 1,\ldots,m+n,$$

то расчет закончен и следует найти полученное базисное решение. Значения базисных переменных содержатся в столбце *БР*, а остальные переменные полагаются равными нулю, как свободные.

Проанализировать полученное базисное решение:

- если число нулевых оценок $\Delta_j = 0$ равно числу базисных переменных, задача имеет *единственное решение*. Если число нулевых оценок $\Delta_j = 0$ превышает число базисных переменных, то задача имеет *бесконечное множество решений*;
- если все Δ_j неположительны, но базисное решение содержит хотя бы одну искусственную переменную, не равную нулю, то *ограничения задачи несовместны*;

б) если среди оценок есть положительные, то следует найти среди них максимальную:

$$\Delta_r = \max_{j \in J_H} \Delta_j,$$

где J_H – множество индексов небазисных переменных, и проанализировать коэффициенты столбца таблицы, которому соответствует максимальная положительная оценка (если таких оценок несколько, принято выбирать оценку с наименьшим номером). Если этот столбец содержит хотя бы один положительный коэффициент, то номер столбца обозначается через r и переменная, соответствующая ему, должна быть введена в число базисных. Если среди коэффициентов этого столбца нет ни одного положительного коэффициента, то это означает, что множество допустимых решений задачи не ограничено, функция $f(x)$ не ограничена сверху и *задача решения не имеет*.

Столбец, соответствующий выбранной оценке, помечается $\otimes$. Он называется *разрешающим*.

Шаг 5. Поделить элементы столбца базисных решений (*БР*) на соответствующие элементы разрешающего столбца и среди полученных частных выбрать наименьшее. Строка, соответствующая выбранному отношению, помечается $\otimes$. Она называется *разрешающей*.

Таким образом, новая переменная x_r вводится на место переменной x_{s_B}, удаляемой из числа базисных, номер которой s_B, а также номер s соответствующей строки таблицы, определяются из условия

$$\min_{1 \le i \le m} \left[\frac{\overline{x}_{i_B}}{\overline{a}_{ir}} \right] = \frac{\overline{x}_{s_B}}{\overline{a}_{sr}},$$

где $\overline{x}_{i_B}$ – значение координаты текущего базисного решения, соответствующей i-й строке; $\overline{a}_{ir}$ – коэффициент при координате x_r в i-й строке. Если таких переменных окажется больше одной, то из базиса выводится та переменная, которая имеет больший номер. Заметим, что рассматриваются только неотрицательные отношения, т.е. если коэффициент $\overline{a}_{ir}$ отрицателен или равен нулю, то отношение не подсчитывается и на его месте в приведенных далее таблицах ставится знак «--». Элемент $\overline{a}_{sr}$, расположенный на пересечении разрешающей строки и разрешающего столбца, называется *разрешающим* и выделяется в таблице прямоугольником.

Удобно использовать следующее правило: из числа базисных выводится переменная, соответствующая разрешающей строке, а на ее место вводится переменная, соответствующая разрешающему столбцу.

Шаг 6. Вычислить новое базисное решение, осуществив пересчет таблицы:

а) вместо координаты x_{s_B} в состав базисных ввести координату x_r, значение которой находится по формуле

$$x_r = \frac{\overline{x}_{s_B}}{\overline{a}_{sr}},$$

и пересчитать s-ю строку, в которой произошли изменения по базису:

$$a_{sj} = \frac{\overline{a}_{sj}}{\overline{a}_{sr}}, \quad j = 1, \ldots, m+n.$$

Таким образом, каждый элемент строки, отмеченной $\otimes$, делится на разрешающий элемент $\overline{a}_{sr}$;

б) вычислить все остальные коэффициенты:

$$a_{ij} = \overline{a}_{ij} - a_{sj}\,\overline{a}_{ir} = \overline{a}_{ij} - \frac{\overline{a}_{sj}}{\overline{a}_{sr}}\,\overline{a}_{ir}, \quad i = 1, \ldots, m;\ i \ne s;\ \ j = 1, \ldots, m+n.$$

Новое базисное решение определить на основании текущего базисного решения по формулам

$$x_{i_B} = \overline{x}_{i_B} - \overline{a}_{ir}\,x_r, \quad \forall i_B \colon i_B \ne s_B.$$

Для упрощения вычислений по приведенным формулам используется «правило прямоугольника».

Пусть подсчитывается значение a_{ij}. Следует соединить элемент $\overline{a}_{ij}$ в предыдущей таблице с разрешающим элементом $\boxed{\overline{a}_{sr}}$. Получена одна из диагоналей прямоугольника. Вторую диагональ образует соединение элементов $\overline{a}_{ir}$ и $\overline{a}_{sj}$.

Далее из текущего значения $\overline{a}_{ij}$ вычитается произведение элементов $\overline{a}_{ir}$ и $\overline{a}_{sj}$, деленное на разрешающий элемент $\overline{a}_{sr}$ (рис.1).

$$a_{ij} = \overline{a}_{ij} - \frac{\overline{a}_{sj} \cdot \overline{a}_{ir}}{\overline{a}_{sr}}$$

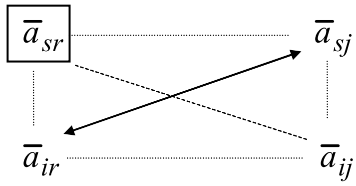


Рис. 1

Перейти к шагу 3.

З а м е ч а н и я.

1. Если в задаче в каждом уравнении имеется базисная переменная, то на шаге 1 нет необходимости делать линейные преобразования или вводить искусственные переменные.

2. Если решается задача поиска минимума, то стратегия симплекс-метода аналогична, только в базис вводится переменная, которой соответствует наименьшая отрицательная оценка Δ_r. Процесс перехода заканчивается, когда найдено такое базисное решение, что все относительные оценки Δ_j, $j = 1, \ldots, m+n$, становятся неотрицательными: $\Delta_j \ge 0$, $j = 1, \ldots, m+n$.

Пример 1. Найти максимум и минимум в задаче

$$f(x) = -x_1 + 2x_2 - x_3 - x_4 \to \text{extr},$$
$$-x_1 + x_2 + \underline{x_3} = 2,$$
$$x_1 + x_2 + \underline{x_4} = 4,$$
$$x_j \ge 0, \quad j = 1, \ldots, 4.$$

☐ Решается каноническая задача. Переменные x_3 и x_4 являются базисными, так как они входят только в одно уравнение, причем с коэффициентом +1.

Сначала решим задачу графически:

а) выразим базисные переменные через небазисные (свободные) и используем условие $x_j \ge 0,\ j = 1, \ldots, 4$:

$$x_3 = 2 + x_1 - x_2 \ge 0, \quad x_4 = 4 - x_1 - x_2 \ge 0,$$
$$x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0;$$

б) выразим целевую функцию через небазисные (свободные) переменные:

$$f(x) = -x_1 + 2x_2 - 2 - x_1 + x_2 - 4 + x_1 + x_2 = -6 - x_1 + 4x_2;$$

в) решим полученную задачу линейного программирования

$$f(x) = -6 - x_1 + 4x_2 \to \text{extr},$$
$$2 + x_1 - x_2 \ge 0,$$
$$4 - x_1 - x_2 \ge 0,$$
$$x_1 \ge 0, \quad x_2 \ge 0.$$

Для этого построим соответствующее множество допустимых решений X. Затем найдем градиент: $\nabla f(x) = (-1; 4)^T$, проведем линию уровня функции перпендикулярно градиенту и будем передвигать ее параллельно самой себе до касания с множеством допустимых решений.

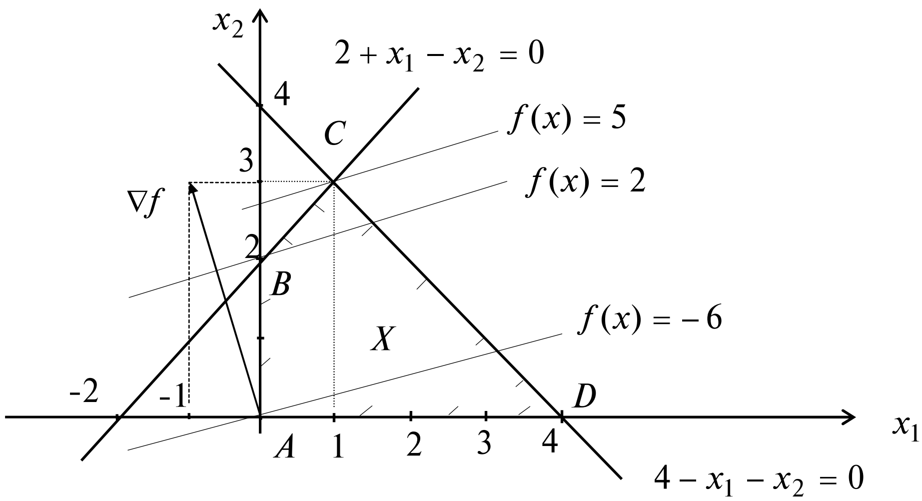


Рис. 1

Так как градиент направлен в сторону наискорейшего возрастания функции в данной точке, то в точке $C = (1, 3)^T$ достигается максимум (рис. 1). Значения остальных переменных находятся из условий связи: $x_3 = 2 + 1 - 3 = 0;$ $x_4 = 4 - 1 - 3 = 0.$ В результате получаем ответ в исходной задаче $x^*_{\max} = (1, 3, 0, 0)^T$.

Заметим, что минимум достигается в точке $D = (4, 0)^T$. При этом $x_3 = 2 + 4 - 0 = 6;$ $x_4 = 4 - 4 - 0 = 0.$ В результате получаем точку минимума в исходной задаче $x^*_{\min} = (4, 0, 6, 0)^T$.

Решим поставленную каноническую задачу симплекс-методом.

1. Найдем начальное базисное решение:

а) нет необходимости вводить искусственные переменные, так как в каждом уравнении уже есть базисная переменная;

б) подчеркнем базисные переменные x_3 и x_4 в уравнениях, описывающих ограничения;

в) свободными переменными являются x_1 и x_2;

г) начальное базисное решение находится при приравнивании нулю свободных переменных: $x_1 = x_2 = 0$. Тогда $x_3 = 2$, $x_4 = 4$. Начальное базисное решение $x = (0; 0; 2; 4)^T$. Ему соответствует точка A на рис. 1.

2. Заполним табл. 1 согласно алгоритму с учетом результатов п.1.

Таблица 1

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	2	-1	1	1	0	
-1	x_4	4	1	1	0	1	
							z_j
							Δ_j

3[1]. Вычислим относительные оценки Δ_j, $j = 1,\dots,4$:

$$\Delta_1 = -1 - [(-1)\cdot(-1) + (-1)\cdot 1] = -1, \qquad z_1 = (-1)\cdot(-1) + (-1)\cdot 1 = 0;$$

$$\Delta_2 = 2 - [(-1)\cdot 1 + (-1)\cdot 1] = 4, \qquad z_2 = (-1)\cdot 1 + (-1)\cdot 1 = -2;$$

$$\Delta_3 = -1 - [(-1)\cdot 1 + (-1)\cdot 0] = 0, \qquad z_3 = (-1)\cdot 1 + (-1)\cdot 0 = -1;$$

$$\Delta_4 = -1 - [(-1)\cdot 0 + (-1)\cdot 1] = 0, \qquad z_4 = (-1)\cdot 0 + (-1)\cdot 1 = -1$$

и занесем их в табл. 2.

Таблица 2

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	2	-1	1	1	0	
-1	x_4	4	1	1	0	1	
			0	-2	-1	-1	z_j
			-1	4	0	0	Δ_j
				$\otimes$			

4[1]. Проанализируем относительные оценки. Оценка $\Delta_2 = 4 > 0$ наибольшая положительная. Проведем анализ столбца x_2. Все коэффициенты положительны, $r = 2$. Введем в базис переменную x_2.

5[1]. Определим переменную, выводимую из базиса. Для этого вычислим наименьшее из неотрицательных отношений $\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$, оно равно 2 (табл. 3). Поэтому $s = 1$ и выведем переменную x_3, расположенную в первой строке.

Таблица 3

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	2	-1	$\boxed{1}$	1	0	$\frac{2}{1}=2$ ⊗
-1	x_4	4	1	1	0	1	$\frac{4}{1}=4$
			0	-2	-1	-1	z_j
			-1	4	0	0	Δ_j
				⊗			

6[1]. Вычислим новое базисное решение. Результаты пересчета табл. 3 приведены в табл. 4.

Таблица 4

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
2	x_2	2	-1	1	1	0	
-1	x_4	2	2	0	-1	1	
							z_j
							Δ_j

В табл. 4 в столбец *БП* введена переменная x_2 вместо x_3 (табл. 3). Первой пересчитывается строка, соответствующая введенной переменной x_2. Она получается в результате деления каждого элемента разрешающей строки табл. 3, помеченной ⊗, на разрешающий элемент, равный 1. Остальные элементы пересчитаем по «правилу прямоугольника». Для второй строки табл. 3 имеем:

$$4-\frac{1\cdot 2}{1}=2,\quad 1-\frac{1\cdot(-1)}{1}=2,\quad 1-\frac{1\cdot 1}{1}=0,\quad 0-\frac{1\cdot 1}{1}=-1,\quad 1-\frac{1\cdot 0}{1}=1.$$

Перейдем к шагу 3.

3[2]. Вычислим относительные оценки Δ_j, $j=1,\ldots,4$. Строку Δ_j пересчитаем, воспользовавшись табл. 3, также по «правилу прямоугольника» (табл. 5):

$$\Delta_1=-1-\frac{4\cdot(-1)}{1}=3,\quad \Delta_2=4-\frac{4\cdot 1}{1}=0,\quad \Delta_3=0-\frac{4\cdot 1}{1}=-4,\quad \Delta_4=0-\frac{0\cdot 4}{1}=0.$$

4[2]. Проанализируем относительные оценки и, как следствие, текущее базисное решение $x_2=2, x_4=2,\ x_1=x_3=0$. Ему соответствует точка *B* на рис. 1.

Оценка $\Delta_1=3>0$ – наибольшая положительная. Следовательно, исследуемое решение не является оптимальным. Проанализируем столбец x_1. Среди его коэффициентов есть положительный, $r=1$. Введем в базис переменную x_1.

Таблица 5

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
2	x_2	2	-1	1	1	0	
-1	x_4	2	2	0	-1	1	
			-4	2	3	-1	z_j
			3	0	-4	0	Δ_j
			$\otimes$				

5^2. Определим переменную, которая должна быть выведена из базиса. Для этого вычислим наименьшее из неотрицательных отношений $\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$. Оно единственно и равно единице (табл. 6). Следовательно, $s = 2$ и переменная x_1 заменяется переменной x_4, расположенной во второй строке.

Таблица 6

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
2	x_2	2	-1	1	1	0	--
-1	x_4	2	$\boxed{2}$	0	-1	1	$\frac{2}{2}=1$ $\otimes$
			-4	2	3	-1	z_j
			3	0	-4	0	Δ_j
			$\otimes$				

6^2. Вычислим новое базисное решение. Результаты пересчета табл. 6 приведены в табл. 7.

Таблица 7

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
2	x_2	3	0	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
-1	x_1	1	1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
							z_j
							Δ_j

В табл. 7 в столбец *БП* на место x_4 введена переменная x_1. Первой пересчитывается строка, соответствующая введенной переменной x_1. Она получается в результате деления каждого элемента разрешающей строки табл. 6, помеченной $\otimes$, на разрешающий элемент, равный 2. Остальные элементы пересчитываются по «правилу прямоугольника». Для первой строки имеем:

$$2-\frac{2\cdot(-1)}{2}=3,\ -1-\frac{(-1)\cdot 2}{2}=0,\ 1-\frac{0\cdot(-1)}{2}=1,\ 1-\frac{(-1)\cdot(-1)}{2}=\frac{1}{2},\quad 0-\frac{(-1)\cdot 1}{2}=\frac{1}{2}.$$

Перейдем к шагу 3.

3^3. Вычислим относительные оценки Δ_j, $j=1,\dots,4$. Строка Δ_j пересчитывается по табл. 6 с применением «правила прямоугольника» (табл. 8):

$$\Delta_1=3-\frac{3\cdot 2}{2}=0,\quad \Delta_2=0-\frac{3\cdot 0}{2}=0,\quad \Delta_3=-4-\frac{3\cdot(-1)}{2}=-\frac{5}{2},\quad \Delta_4=0-\frac{3\cdot 1}{2}=-\frac{3}{2}.$$

Таблица 8

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
2	x_2	3	0	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
-1	x_1	1	1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	
			-1	2	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	z_j
			0	0	$-\frac{5}{2}$	$-\frac{3}{2}$	Δ_j

4^3. Проанализируем относительные оценки и, как следствие, текущее базисное решение $x_2=3$, $x_1=1$, $x_3=x_4=0$. Так как все $\Delta_j\le 0$, на текущем базисном решении достигается максимум. Так как число нулевых оценок равно числу базисных переменных, то решение единственное. Этому решению соответствует точка C на рис. 1. Таким образом, в процессе применения процедуры симплекс-метода произошел направленный перебор вершин множества допустимых решений. Переход из вершины A в вершину B , а затем в C связан с последовательным увеличением значения целевой функции.

Найдем минимум в поставленной задаче. Используем табл. 2, т.е. будем считать, что шаги 1–3 алгоритма реализованы (табл. 9).

Таблица 9

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	2	-1	1	1	0	--
-1	x_4	4	$\boxed{1}$	1	0	1	$\frac{4}{1}=4$ ⊗
			0	-2	-1	-1	z_j
			-1	4	0	0	Δ_j
			⊗				

4^1. Проанализируем относительные оценки. Поскольку ищется минимум, условием окончания процесса является неотрицательность всех относительных оценок, а при выборе разрешающего столбца следует найти наименьшую отрицательную оценку. Оценка $\Delta_1=-1$ – наименьшая отрицательная. Проанализируем столбец x_1. Среди коэффициентов есть положительный, поэтому $r=1$. Введем в базис переменную x_1.

5^1. Определим переменную, которая должна быть выведена из базиса. Для этого вычислим наименьшее из неотрицательных отношений $\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$. Оно единственно и равно 4 (табл. 9). Следовательно, $s = 2$ и в базисе переменная x_4 заменяется переменной x_1, расположенной во второй строке.

6^1. Вычислим новое базисное решение. Результаты пересчета табл. 9 приведены в табл. 10.

Таблица 10

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	6	0	2	1	1	
-1	x_1	4	1	1	0	1	
							z_j
							Δ_j

В табл. 10 в столбец *БП* на место x_4 введена переменная x_1. Первой пересчитывается строка, соответствующая введенной переменной x_1. Она получается в результате деления каждого элемента разрешающей строки табл. 9, помеченной ⊗, на разрешающий элемент, равный 1. Элементы первой строки пересчитываются по «правилу прямоугольника»: $2 - \frac{4 \cdot (-1)}{1} = 6, -1 - \frac{1 \cdot (-1)}{1} = 0$, $1 - \frac{1 \cdot (-1)}{1} = 2$, $1 - \frac{0 \cdot (-1)}{1} = 1$, $0 - \frac{(-1) \cdot 1}{1} = 1$.

Перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим относительные оценки Δ_j, $j = 1, \ldots, 4$. Строка Δ_j пересчитывается по табл. 10 согласно «правилу прямоугольника» (табл. 11):

$$\Delta_1 = -1 - \frac{(-1) \cdot 1}{1} = 0,\ \Delta_2 = 4 - \frac{(-1) \cdot 1}{1} = 5,\quad \Delta_3 = 0 - \frac{(-1) \cdot 0}{1} = 0,\quad \Delta_4 = 0 - \frac{(-1) \cdot 1}{1} = 1.$$

Таблица 11

			-1	2	-1	-1	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_3	6	0	2	1	1	
-1	x_1	4	1	1	0	1	
			-1	-3	-1	-2	z_j
			0	5	0	1	Δ_j

4^2. Проанализируем относительные оценки и, как следствие, текущее базисное решение $x_3 = 6$, $x_1 = 4$, $x_2 = x_4 = 0$. Так как все оценки $\Delta_j \geq 0$, на текущем базисном решении достигается минимум. Поскольку число нулевых оценок равно числу базисных переменных, то решение единственное. Этому решению соответствует точка D на рис.1. ■

Занятие 7. ЗАДАЧА ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ. РЕШЕНИЕ ОСНОВНОЙ ЗАДАЧИ

А.2. Решение основной задачи

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j \ge b_i, \quad i = 1,\dots,m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j \le b_i, \quad i = m+1,\dots,p;$$

$$x_j \ge 0, \quad j = 1,\dots,n.$$

Задача линейного программирования называется *основной*. Предполагается, что $b_i \ge 0$, $i = 1,\dots,p$.

Стратегия поиска

Для решения основной задачи симплекс-методом она должна быть приведена к канонической задаче путем введения в каждое ограничение по одной дополнительной переменной: в каждое ограничение-неравенство со знаком «$\le$» вводится дополнительная переменная со знаком «$+$» (она становится базисной), а в каждое ограничение-неравенство со знаком «$\ge$» вводится дополнительная переменная со знаком «–».

Каноническая задача записывается следующим образом:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j - x_{n+i} = b_i, \quad i = 1,\dots,m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j + \underline{x_{n+i}} = b_i, \quad i = m+1,\dots,p;$$

$$x_1 \ge 0,\dots, x_{n+p} \ge 0.$$

Так как в общем случае в уравнениях нет базисных переменных, то для того, чтобы можно было применить симплекс-метод, делается переход к *M*-задаче. В каждое из m первых уравнений вводится искусственная переменная со знаком «$+$» (она становится базисной), а к целевой функции добавляется сумма искусственных переменных, умноженная на «$-M$». В результате получаем задачу в *расширенной форме*:

$$f(x)=\sum_{j=1}^{n} c_j x_j - M\sum_{i=1}^{m} x_{n+p+i} \to \max,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - x_{n+i} + \underline{x_{n+p+i}} = b_i, \quad i=1,\dots,m;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j + \underline{x_{n+i}} = b_i, \quad i=m+1,\dots,p;$$

$$x_1 \ge 0,\dots,x_{n+p+m} \ge 0.$$

З а м е ч а н и я. Если решается задача поиска минимума целевой функции, то при переходе к M-задаче перед числом M ставится знак «$+$».

Пример 1. Найти условный максимум в задаче

$$f(x)=x_1-x_2 \to \max,$$
$$-1x_1+2x_2 \ge 4,$$
$$3x_1+2x_2 \le 14,$$
$$x_1,x_2 \ge 0.$$

□ Приведем поставленную основную задачу к канонической. Так как первое неравенство имеет знак «$\ge$» , введем дополнительную переменную x_3 со знаком «–». Поскольку во втором неравенстве знак «$\le$», то введем дополнительную переменную x_4 со знаком «+» (она становится базисной). В итоге получим каноническую задачу:

$$f(x)=x_1-x_2 \to \max,$$
$$-x_1+2x_2-x_3=4,$$
$$3x_1+2x_2+\underline{x_4}=14,$$
$$x_1,\dots,x_4 \ge 0.$$

Поскольку в первом уравнении нет базисных переменных, то перейдем к M-задаче. Для этого введем искусственную переменную x_5 и добавим ее к целевой функции с коэффициентом «$-M$». В результате получим задачу в расширенной форме:

$$f(x)=x_1-x_2-M\,x_5 \to \max,$$
$$-1x_1+2x_2-1x_3+0x_4+1\underline{x_5}=4,$$
$$3x_1+2x_2+0x_3+1\underline{x_4}+0x_5=14,$$
$$x_1,\dots,x_5 \ge 0.$$

Применим алгоритм симплекс-метода.

1. Найдем начальное базисное решение. Базисными переменными являются x_5, x_4, а свободными x_1, x_2, x_3. Приравняем свободные переменные к нулю. Тогда

$x_1 = x_2 = x_3 = 0$ и $x_4 = 14, x_5 = 4$. Начальное базисное решение $(0; 0; 0; 14; 4)^T$. Начальному базисному решению соответствует начало координат на рис. 1.

2. Заполним табл. 1 согласно алгоритму.

Таблица 1

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
$-M$	x_5	4	-1	2	-1	0	1	
0	x_4	14	3	2	0	1	0	
								z_j
								Δ_j

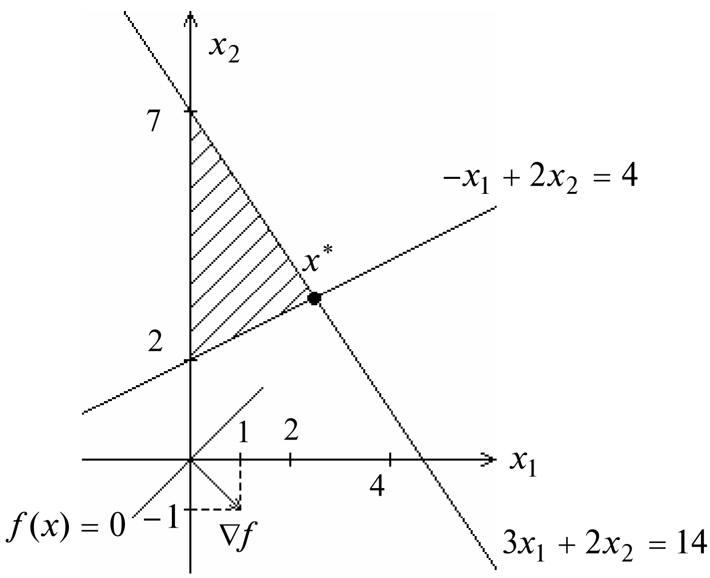


Рис. 1

3^1. Вычислим относительные оценки Δ_j, $j = 1, \dots, 5$:

$\Delta_1 = 1 - [(-M) \cdot (-1) + 0 \cdot 3] = 1 - M$; $\Delta_2 = -1 - [(-M) \cdot 2 + 0 \cdot 2] = -1 + 2M$;

$\Delta_3 = 0 - [(-M) \cdot (-1) + 0 \cdot 0] = -M$; $\Delta_4 = 0 - [(-M) \cdot 0 + 0 \cdot 1] = 0$;

$\Delta_5 = -M - [(-M) \cdot 1 + 0 \cdot 0] = 0$.

Результаты приведены в табл. 2.

Таблица 2

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
$-M$	x_5	4	-1	2	-1	0	1	
0	x_4	14	3	2	0	1	0	
			M	$-2M$	M	0	$-M$	z_j
			$1-M$	$-1+2M$	$-M$	0	0	Δ_j
				$\otimes$				

4[1]. Проанализируем относительные оценки. Оценка $\Delta_2 = -1+2M > 0$, так как $M > 0$ и, следовательно, текущее базисное решение $x_4 = 14$, $x_5 = 4$, $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ не оптимально. Рассмотрим коэффициенты столбца при переменной x_2. Поскольку оба коэффициента положительны, то $r = 2$ и переменная x_2 должна быть введена в число базисных.

5[1]. Определим переменную, выводимую из базиса. Для этого вычислим отношения $\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$. Имеем $\dfrac{4}{2}, \dfrac{14}{2}$ (табл. 3). Выберем из них наименьшее значение. Следовательно, $s = 1$ и из числа базисных должна быть удалена переменная x_5 и заменена переменной x_2.

Таблица 3

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
$-M$	x_5	4	-1	$\boxed{2}$	-1	0	1	$2 \otimes$
0	x_4	14	3	2	0	1	0	7
			M	$-2M$	M	0	$-M$	z_j
			$1-M$	$-1+2M$	$-M$	0	0	Δ_j
				$\otimes$				

6[1]. Вычислим новое базисное решение, занося результаты пересчета табл. 3 в табл. 4.

Таблица 4

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\dfrac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_2	2	$-\dfrac{1}{2}$	1	$-\dfrac{1}{2}$	0	$\dfrac{1}{2}$	
0	x_4	10	4	0	1	1	-1	
								z_j
								Δ_j

В табл. 4 в столбец *БП* введена переменная x_2 вместо x_5. Первой пересчитывается строка, соответствующая введенной переменной x_2. Она получается в результате деления каждого элемента разрешающей строки табл. 3, помеченной ⊗, на разрешающий элемент, равный 2. Остальные элементы пересчитываются по «правилу прямоугольника». Для второй строки имеем:

$$14-\frac{4\cdot 2}{2}=10,\quad 3-\frac{2\cdot(-1)}{2}=4,\quad 2-\frac{2\cdot 2}{2}=0,$$

$$0-\frac{2\cdot(-1)}{2}=1,\quad 1-\frac{2\cdot 0}{2}=1,\quad 0-\frac{1\cdot 2}{2}=-1.$$

Перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим оценки Δ_j, $j=1,\dots,5$. Строка Δ_j пересчитывается по табл. 3 также согласно «правилу прямоугольника»:

$$\Delta_1=1-M-\frac{(-1+2M)\cdot(-1)}{2}=\frac{1}{2},\quad \Delta_2=0,\quad \Delta_3=-M-\frac{(-1+2M)\cdot(-1)}{2}=-\frac{1}{2},$$

$$\Delta_4=0-\frac{(-1+2M)\cdot 0}{2}=0;\quad \Delta_5=0-\frac{(-1+2M)\cdot 1}{2}=-M+\frac{1}{2}.$$

Таблица 5

			1	−1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
−1	x_2	2	$-\frac{1}{2}$	1	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	
0	x_4	10	4	0	1	1	−1	
			$\frac{1}{2}$	−1	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	z_j
			$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	0	$-M+\frac{1}{2}$	Δ_j
			⊗					

4^2. Проанализируем относительные оценки и, как следствие, текущее базисное решение $x_2=2$, $x_4=10$, $x_1=x_3=x_5=0$. Оценка $\Delta_1=\frac{1}{2}>0$, поэтому рассмотрим коэффициенты столбца при переменной x_1. Так как этот столбец содержит один положительный коэффициент, то $r=1$ и переменная x_1 должна быть введена в число базисных переменных.

5^2. Определим переменную, выводимую из базиса. Для этого вычислим наименьшее из неотрицательных отношений $\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$. Оно равно $\frac{10}{4}$ (табл. 6).

Следовательно, $s = 2$ и поэтому из базиса должна быть удалена переменная x_4 и заменена переменной x_1.

Таблица 6

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_2	2	$-\frac{1}{2}$	1	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	--
0	x_4	10	$\boxed{4}$	0	1	1	-1	$\frac{10}{4}$ $\otimes$
			$\frac{1}{2}$	-1	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	z_j
			$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$	0	$-M+\frac{1}{2}$	Δ_j
			$\otimes$					

6^2. Вычислим новое базисное решение. Результат пересчета табл. 6 приведен в табл. 7.

Таблица 7

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_2	$\frac{26}{8}$	0	1	$-\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	
1	x_1	$\frac{10}{4}$	1	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	
								z_j
								Δ_j

Перейдем к шагу 3.

3^3. Вычислим оценки Δ_j, $j = 1, \ldots, 5$, и определим, является ли решение $x_1 = \frac{10}{4}$, $x_2 = \frac{26}{8}$, $x_3 = x_4 = x_5 = 0$ оптимальным (табл. 8).

Таблица 8

			1	-1	0	0	$-M$	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
-1	x_2	$\frac{26}{8}$	0	1	$-\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	
1	x_1	$\frac{10}{4}$	1	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	
			1	-1	$\frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}$	$-\frac{5}{8}$	z_j
			0	0	$-\frac{5}{8}$	$-\frac{1}{8}$	$-M+\frac{5}{8}$	Δ_j

Все оценки Δ_j неположительны, следовательно, решение $x_1 = \frac{10}{4}$, $x_2 = \frac{26}{8}$, $x_3 = x_4 = x_5 = 0$ является оптимальным. Решение исходной задачи $x_1^* = \frac{10}{4}$, $x_2^* = \frac{26}{8}$ получается путем отбрасывания дополнительных переменных x_3, x_4 и искусственной переменной x_5. Графически оно соответствует точке x^* (рис. 1). ■

Пример 2. Найти условный максимум в задаче

$$
\begin{aligned}
&f(x) = -2x_1 + 4x_2 \to \max,\\
&-x_1 + 2x_2 \le 4,\\
&3x_1 + 2x_2 \le 14,\\
&x_1, x_2 \ge 0.
\end{aligned}
$$

□ Приведем поставленную основную задачу к канонической. Так как оба неравенства имеют знак «≤», то введем дополнительные переменные x_3 и x_4 со знаком «+» (они становятся базисными). В итоге получим каноническую задачу:

$$
\begin{aligned}
&f(x) = -2x_1 + 4x_2 \to \max,\\
&-1x_1 + 2x_2 + 1\underline{x_3} + 0x_4 = 4,\\
&3x_1 + 2x_2 + 0x_3 + 1\underline{x_4} = 14,\\
&x_1, x_2, x_3, x_4 \ge 0.
\end{aligned}
$$

Решим ее симплекс-методом.

1. Найдем начальное базисное решение: $x_1 = x_2 = 0$ (так как x_1, x_2 – свободные переменные), $x_3 = 4$, $x_4 = 14$.

2. Заполним табл. 1 согласно алгоритму.

Таблица 1

			-2	4	0	0	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
0	x_3	4	-1	2	1	0	
0	x_4	14	3	2	0	1	
							z_j
							Δ_j

3[1]. Вычислим оценки Δ_j, $j = 1, \ldots, 4$, и определим, является ли базисное решение $x_3 = 4, x_4 = 14$, $x_1 = x_2 = 0$ оптимальным (табл. 2).

Таблица 2

			-2	4	0	0	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
0	x_3	4	-1	2	1	0	
0	x_4	14	3	2	0	1	
			0	0	0	0	z_j
			-2	4	0	0	Δ_j
				$\otimes$			

4[1]. Проанализируем относительные оценки. Оценка $\Delta_2 > 0$, поэтому исследуемое решение не является оптимальным. Рассмотрим столбец x_2. Его коэффициенты положительны. Значит, $r = 2$ и в базис должна быть введена переменная x_2.

5[1]. Определим переменную, которая должна быть выведена из базиса, вычислив наименьшее из неотрицательных отношений $\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$. Оно равно 2 (табл. 3). Следовательно, из базиса должна быть выведена переменная x_3 и заменена переменной x_2.

Таблица 3

			-2	4	0	0	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
0	x_3	4	-1	$\boxed{2}$	1	0	2 $\otimes$
0	x_4	14	3	2	0	1	7
			0	0	0	0	z_j
			-2	4	0	0	Δ_j
				$\otimes$			

6^1. Вычислим новое базисное решение. Результаты пересчета табл. 3 приведены в табл. 4.

Таблица 4

			-2	4	0	0	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
4	x_2	2	$-\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0	
0	x_4	10	4	0	-1	1	
							z_j
							Δ_j

Перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим оценки Δ_j, $j = 1,\dots,4$, и определим, является ли решение $x_2 = 2, x_4 = 10, x_1 = x_3 = 0$ оптимальным (табл. 5).

Таблица 5

			-2	4	0	0	c_j
c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
4	x_2	2	$-\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0	
0	x_4	10	4	0	-1	1	
			-2	4	2	0	z_j
			0	0	-2	0	Δ_j

4^2. Все оценки Δ_j, $j = 1,\dots,4$, неположительны, значит, исследуемое решение $x_2{}^* = 2, x_4{}^* = 10, x_1{}^* = x_3{}^* = 0$ оптимально. Значение целевой функции в точке максимума $f_{\max} = 8$. Найденному решению соответствует вершина *A* на рис. 2. Однако, как следует из геометрической интерпретации исходной задачи, она имеет бесконечное множество решений, лежащих на ребре *AB*. В этом легко убедиться с помощью симплекс-метода, если ввести в базис переменную x_1 вместо переменной x_4, которой соответствует оценка $\Delta_4 = 0$. Соответствующие расчеты приведены в табл. 6. Заметим, что равенство нулю оценки Δ_1 для небазисной переменной x_1 также свидетельствует о наличии бесконечного множества решений.

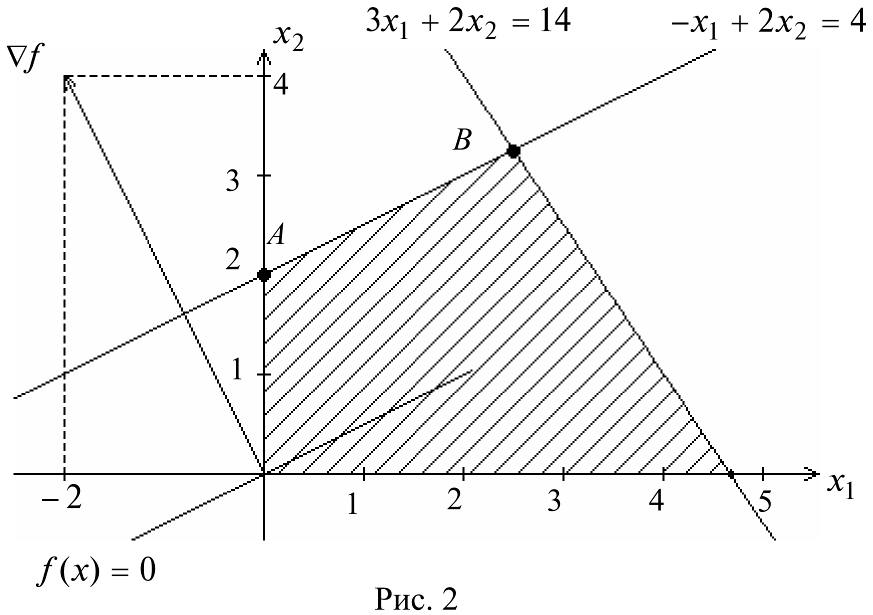


Рис. 2

Таблица 6

c_{i_B}	*БП*	*БР*	x_1	x_2	x_3	x_4	$\frac{БР}{\overline{a}_{ir}}$
			–2	4	0	0	c_j
4	x_2	$\frac{26}{8}$	0	1	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$	
–2	x_1	$\frac{10}{4}$	1	0	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	
			–2	4	2	0	z_j
			0	0	–2	0	Δ_j

Все оценки Δ_j, $j = 1,\dots,4$ неположительны, значит, исследуемое базисное решение $x_2^* = \frac{26}{8}; x_1^* = \frac{10}{4}; x_3^* = x_4^* = 0$ оптимально. Значение целевой функции в точке максимума $f_{\max} = 8$. Полученному решению соответствует вершина B на рис. 2. Равенство нулю оценки Δ_4 для небазисной переменной x_4 в табл. 6 свидетельствует о наличии бесконечного множества решений. ■

Занятие 8. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ЛИНЕЙНОГО ЦЕЛОЧИСЛЕННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

МЕТОД ВЕТВЕЙ И ГРАНИЦ

Постановка задачи

Найти максимум функции

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i, \quad i = 1,\dots,m;$$

$$x_j \ge 0, \text{ целые}, \ j = 1,\dots,n.$$

Алгоритм

Шаг 1. Положить $k = 0$, решить задачу ЗЛП-0 без учета требований на целочисленность переменных и определить x^{0*}, $f(x^{0*})$. Проверить целочисленность решения:

а) если решение целочисленное, то расчет закончен: $x^* = x^{0*}$, $f(x^*) = f(x^{0*})$;

б) если решение x^{0*} нецелочисленное, включить $k = 0$ в множество $J = \{k\}$ номеров задач, подлежащих дальнейшему ветвлению, и перейти к шагу 2.

Шаг 2. Выбрать задачу для приоритетного ветвления:

а) если $k = 0$, выбрать для ветвления задачу ЗЛП-0 , исключить номер $k = 0$ из множества $J = \{k\}$ и перейти к шагу 3;

б) если $k \ne 0$ и $J \ne \varnothing$, выбрать номер задачи $k \in J$, которому соответствует максимальное значение целевой функции на оптимальном решении x^{k*}, исключить номер k из множества $J = \{k\}$ и перейти к шагу 3;

в) если $k \ne 0$ и $J = \varnothing$, перейти к шагу 7.

Шаг 3. Осуществить ветвление задачи ЗЛП-k. Для этого выбрать нецелочисленную координату x_j^{k*} по установленному правилу и сформировать:

а) два дополнительных ограничения: $x_j \le \left[x_j^{k*}\right]$, $x_j \ge \left[x_j^{k*}\right] + 1$;

б) две задачи ЗЛП-$2k+i$, $i = 1,2$:

ЗЛП-$2k+1$, получаемую в результате добавления к задаче ЗЛП-k дополнительного ограничения $x_j \le \left[x_j^{k*}\right]$;

ЗЛП-$2k+2$, получаемую в результате добавления к задаче ЗЛП-k дополнительного ограничения $x_j \ge \left[x_j^{k*}\right] + 1$.

Положить $i = 1$ и перейти к шагу 4.

Шаг 4. Решить задачу ЗЛП-$2k+i$:

а) если множество допустимых решений задачи пустое, то исключить задачу из рассмотрения и перейти к шагу 6;
б) если множество допустимых решений задачи не пустое, определить x^{2k+i*}, $f\left(x^{2k+i*}\right)$ и перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить решение x^{2k+i*} на целочисленность:

а) если решение x^{2k+i*} целочисленное и получено первым при ветвлении задач, имеющих нецелочисленное решение, положить $\underline{f} = f(x^{2k+i*})$ и включить решение x^{2k+i*} во множество X^* возможных оптимальных решений исходной задачи.

Сравнить значения $f(x^{k*}), k \in J$, с $\underline{f}$ для нецелочисленных решений, полученных раньше, чем первое целочисленное решение:

- если $f(x^{k*}) \le \underline{f}$, исключить номер k из множества J;
- если $f(x^{k*}) > \underline{f}$, оставить задачу с номером k во множестве J для дальнейшего ветвления;

Перейти к шагу 6;

б) если решение x^{2k+i*} целочисленное, значение $\underline{f}$ уже найдено и $f(x^{2k+i*}) \ge \underline{f}$, то включить решение x^{2k+i*} во множество X^* возможных оптимальных решений исходной задачи. Если $f(x^{2k+i*}) < \underline{f}$, не включать решение x^{2k+i*} во множество X^* и перейти к шагу 6;

в) если решение x^{2k+i*} нецелочисленное и значение $\underline{f}$ еще не найдено, включить номер $2k+i$ во множество J и перейти к шагу 6;

г) если решение x^{2k+i*} нецелочисленное, значение $\underline{f}$ уже найдено и $f(x^{2k+i*}) > \underline{f}$, то включить номер $2k+i$ в множество *J*. В противном случае исключить номер $2k+i$ из рассмотрения и перейти к шагу 6;

Шаг 6. Проверить условие $i \le 2$:

а) если $i < 2$, положить $i = 2$ и перейти к шагу 4;
б) если $i = 2$, перейти к шагу 2.

Шаг 7. В множестве X^* выбрать решение (решения), которому соответствует наибольшее значение целевой функции. Оно является решением x^* исходной задачи. Если множество X^* пустое, то исходная задача не имеет решения.

Пример 1. Найти оптимальное решение задачи

$$f(x) = x_1 + 2x_2 \to \max,$$
$$x_1 + x_2 \le 4,$$
$$x_2 \le 2{,}8,\ \ x_1, x_2 \ge 0, \text{ целые.}$$

☐ 1. Положим $k = 0$. Решим ЗЛП-0, т.е. исходную задачу без учета требования целочисленности, графически. Как следует из рис. 1, *а*, максимум достигается в точке $A = x^{0*} = (1{,}2; 2{,}8)^T$, $f(x^{0*}) = 6{,}8$. Решение не является целочисленным. Включим номер $k = 0$ во множество J и перейдем к шагу 2.

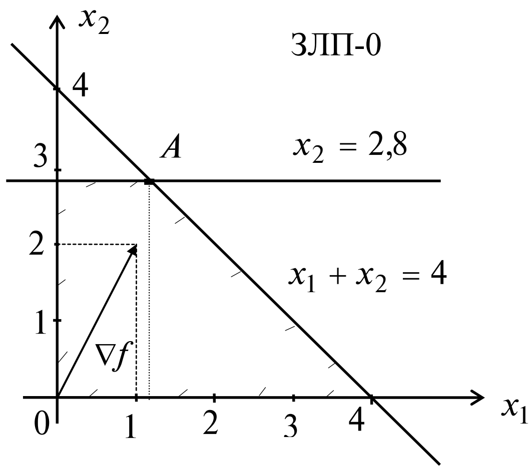
2^0. Так как $k = 0$, выберем для ветвления задачу ЗЛП-0 , исключим $k = 0$ из множества J и перейдем к шагу 3.

3^0. Осуществим ветвление задачи ЗЛП-0. Выберем нецелочисленную координату с наименьшим индексом: $x_1^{0*} = 1{,}2$. Сформируем:

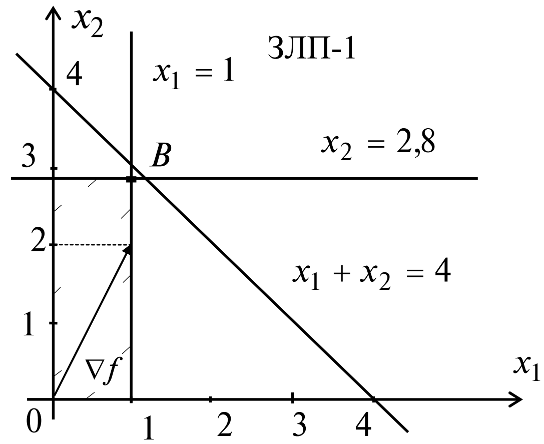
а) дополнительные ограничения: $x_1 \le [1{,}2] = 1$, $x_1 \ge [1{,}2] + 1 = 2$;

б) две задачи ЗЛП-$2k + i$, $k = 0$; $i = 1{,}2$:

ЗЛП-1	**ЗЛП-2**
$f(x) = x_1 + 2x_2 \to \max,$	$f(x) = x_1 + 2x_2 \to \max,$
$x_1 + x_2 \le 4,$	$x_1 + x_2 \le 4,$
$x_2 \le 2{,}8,$	$x_2 \le 2{,}8,$
$x_1, x_2 \ge 0, \quad x_1 \le 1;$	$x_1, x_2 \ge 0, \quad x_1 \ge 2.$

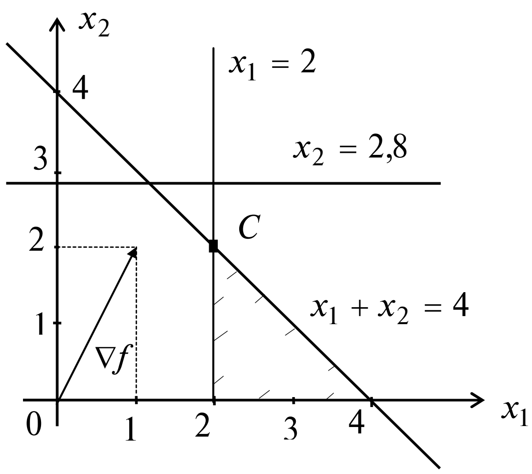


а



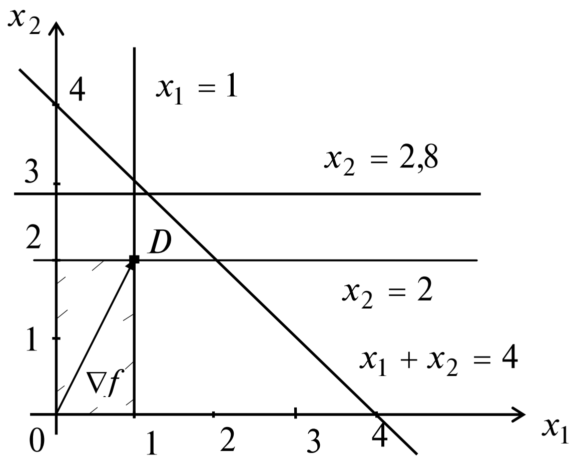
б

ЗЛП-2



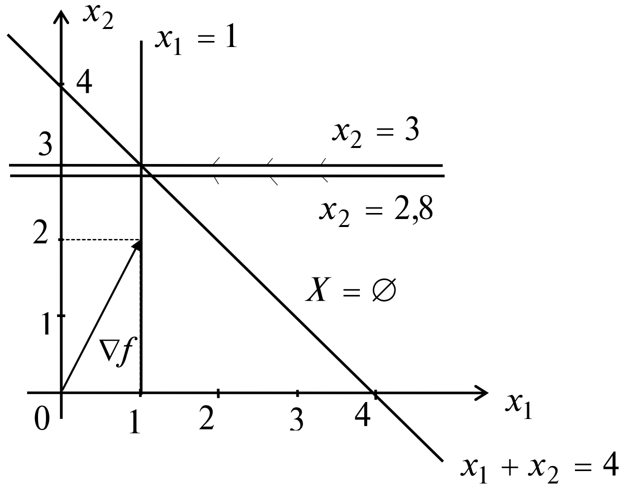
в

ЗЛП-3



г

ЗЛП-4



д

Рис. 1

Положим $i = 1$ и перейдем к шагу 4.

4^0. Решим задачу ЗЛП-1 графически (рис. 1, *б*). Максимум достигается в точке $x^{1*} = B = (1;\ 2,8)^T$, $f(x^{1*}) = 6,6$. Перейдем к шагу 5.

5^0. Решение x^{1*} – нецелочисленное, и значение $\underline{f}$ еще не найдено. Поэтому включим номер $k = 1$ во множество J и перейдем к шагу 6.

6^0. Проверим выполнение условия $i \le 2$: $i = 1 < 2$. Положим $i = 2$ и перейдем к шагу 4.

4^1. Решим задачу ЗЛП-2 графически (рис. 1,*в*). Получим решение в точке $x^{2*} = C = (2;\ 2)^T$, $f(x^{2*}) = 6$. Перейдем к шагу 5.

5^1. Решение x^{2*} – первое целочисленное. Положим $\underline{f} = f(x^{2*}) = 6$. Включим решение x^{2*} во множество X^*. Сравним значение $f(x^{1*})$ с $\underline{f}$. Так как $f(x^{1*}) = 6,6 > \underline{f} = 6$, оставим задачу ЗЛП-1 для дальнейшего ветвления и перейдем к шагу 6.

6^1. Проверим выполнение условия $i \le 2$: $i = 2$. Перейдем к шагу 2.

2^1. Имеем $k = 1$ и $J = \{1\} \ne \varnothing$. Выберем задачу ЗЛП-1 для ветвления. Исключим $k = 1$ из множества J и перейдем к шагу 3.

3^1. Осуществим ветвление задачи ЗЛП-1. Выберем нецелочисленную координату с наименьшим индексом: $x_2^{1*} = 2,8$. Сформируем:

а) дополнительные ограничения: $x_2 \le [2,8] = 2$, $x_2 \ge [2,8] + 1 = 3$;

б) две задачи ЗЛП-$2k + i$, $k = 1$; $i = 1,2$:

ЗЛП-3	**ЗЛП-4**
$f(x) = x_1 + 2x_2 \to \max,$	$f(x) = x_1 + 2x_2 \to \max,$
$x_1 + x_2 \le 4,$	$x_1 + x_2 \le 4,$
$x_2 \le 2,8$	$x_2 \le 2,8$
$x_1, x_2 \ge 0,\ x_1 \le 1,$	$x_1, x_2 \ge 0,\ x_1 \le 1,$
$x_2 \le 2;$	$x_2 \ge 3.$

Положим $i = 1$ и перейдем к шагу 4.

4^2. Решим задачу ЗЛП-3 графически. Условный максимум достигается в точке $x^{3*} = D = (1;\ 2)^T$, $f(x^{3*}) = 5$ (рис. 1,*г*). Перейдем к шагу 5.

5^2. Решение x^{3*} – целочисленное. Так как значение $\underline{f}$ уже найдено, то сравним $f(x^{3*}) = 5$ с $\underline{f}$. Имеем $f(x^{3*}) = 5 < \underline{f} = 6$, поэтому не включаем решение x^{3*} в множество X^* возможных оптимальных решений исходной задачи. Задачу ЗЛП-3 исключим из дальнейшего рассмотрения. Перейдем к шагу 6.

6^1. Проверим выполнение условия $i \le 2$: $i = 1 < 2$. Положим $i = 2$ и перейдем к шагу 4.

4^3. Решим задачу ЗЛП-4 графически. В этой задаче ограничения не совместны (рис. 1,*д*), множество допустимых решений пустое. Исключим задачу ЗЛП-4 из дальнейшего рассмотрения. Перейдем к шагу 6.

6^2. Проверим выполнение условия $i \le 2$: $i = 2$. Перейдем к шагу 2.

2^2. Так как множество $k \ne 0$ и $J = \varnothing$, перейдем к шагу 7.

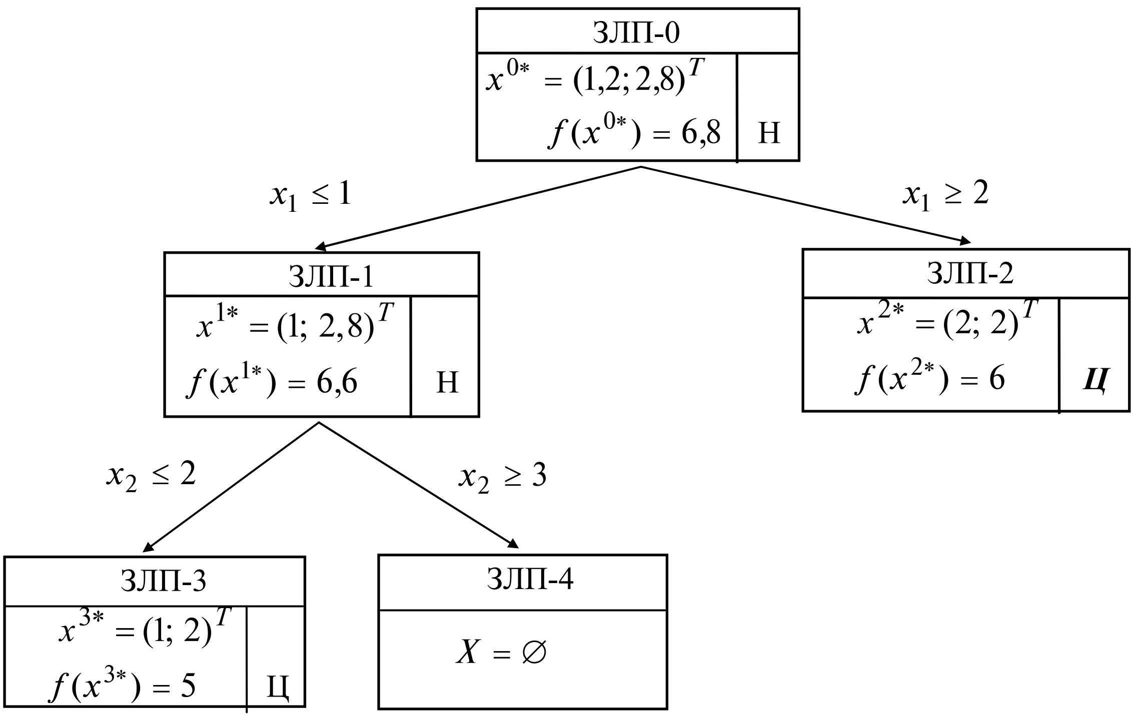


Рис. 2

7^0. Так как множество X^* содержит единственное целочисленное решение, то $x^* = x^{2*} = (2,\ 2)^T$, $f(x^*) = \underline{f} = 6$ – решение исходной задачи. Процесс решения отражен на рис. 2. ■

Занятие 9. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ТРАНСПОРТНЫХ ЗАДАЧ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предположим, что в пунктах $A_1, A_2, \ldots, A_m$ хранится однородный груз в количестве $a_1, a_2, \ldots, a_m$ единиц. Этот груз следует доставить в n заданных пунктов назначения $B_1, B_2, \ldots, B_n$, причем в каждый из них требуется завезти соответственно $b_1, b_2, \ldots, b_n$ единиц этого груза. Обозначим через c_{ij} стоимость перевозки единицы груза из пункта A_i в пункт B_j.

Транспортные задачи делятся на две группы.

1. Задачи, удовлетворяющие *условию баланса* $\sum_{i=1}^{m} a_i = \sum_{j=1}^{n} b_j$, означающему, что общий запас груза на всех пунктах хранения равен суммарной потребности всех пунктов назначения.

2. Задачи с нарушенным балансом, среди которых выделяются два случая:

а) $\sum_{i=1}^{m} a_i > \sum_{j=1}^{n} b_j$ (суммарные запасы больше суммарных потребностей);

б) $\sum_{i=1}^{m} a_i < \sum_{j=1}^{n} b_j$ (суммарные запасы меньше суммарных потребностей).

Рассмотрим формализацию транспортной задачи, удовлетворяющей условию баланса.

Обозначим x_{ij} – количество груза, перевозимого из пункта A_i в пункт B_j. Тогда *суммарная стоимость перевозок* имеет вид

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} c_{ij} \cdot x_{ij} .$$

Ограничения представляются *уравнениями вывоза и привоза* груза:

$$x_{i1} + x_{i2} + \ldots + x_{in} = a_i , \quad i = 1,2,\ldots,m ;$$

$$x_{1j} + x_{2j} + \ldots + x_{mj} = b_j , \quad j = 1,2,\ldots,n ;$$

$$x_{ij} \geq 0 , \quad i = 1,2,\ldots,m ; \quad j = 1,2,\ldots,n .$$

Первое уравнение означает, что из каждого пункта хранения A_i вывозится весь груз, а второе уравнение описывает факт удовлетворения всех потребностей в пункте B_j. Условие неотрицательности свидетельствует о том, что груз либо вывозится из пункта A_i в пункт B_j, и тогда $x_{ij} > 0$, либо нет, и в этом случае $x_{ij} = 0$.

Решение x_{ij}, $i = 1,2,\ldots,m$; $j = 1,2,\ldots,n$, системы называется *планом перевозок*.

Требуется найти такой план перевозок, чтобы их суммарная стоимость была минимальной, т.е.

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} c_{ij} \cdot x_{ij} \to \min .$$

Условия задачи удобно записывать в виде *матрицы перевозок* (табл. 1).

Таблица 1

Пункты	B_1	B_2	...	B_j	...	B_n	Запасы
A_1	c_{11}	c_{12}		c_{1j}		c_{1n}	a_1
A_2	c_{21}	c_{22}		c_{2j}		c_{2n}	a_2
$\vdots$							$\vdots$
A_i	c_{i1}	c_{i2}		c_{ij}		c_{in}	a_i
$\vdots$							$\vdots$
A_m	c_{m1}	c_{m2}		c_{mj}		c_{mn}	a_m
Потребности	b_1	b_2	...	b_j	...	b_n	Сумма

Заметим, что с помощью линейных преобразований можно показать зависимость одного из уравнений в системе от остальных, т.е. в этой системе имеется $(m + n - 1)$ независимых уравнений. Лишнее уравнение может быть исключено из системы уравнений-ограничений.

В матрице перевозок хранится текущий план перевозок x_{ij}, $i = 1,2,\ldots,m$; $j = 1,2,\ldots,n$.

Стратегия решения задачи

Так как поставленная задача является частным случаем задачи линейного программирования, то стратегия решения аналогична:

1) находится начальный план перевозок;

2) производится улучшение начального плана, т.е. последовательный переход от одного плана к другому, связанный с уменьшением суммарной стоимости перевозок. Процесс перехода от одного плана к другому завершается, когда уменьшение суммарной стоимости перевозок станет невозможным.

МЕТОДЫ НАХОЖДЕНИЯ НАЧАЛЬНОГО ПЛАНА ПЕРЕВОЗОК

Клетки матрицы перевозок, где $x_{ij} > 0$, называются *базисными*, а остальные, где $x_{ij} = 0$, – *свободными*. В матрице имеется $(m+n-1)$ базисных клеток. Их число совпадает с числом независимых уравнений-ограничений.

Значение x_{ij} в матрице перевозок находится по формуле

$$x_{ij} = \min \begin{cases} \text{остаток груза в пункте } A_i, \\ \text{неудовлетворенные потребности в пункте } B_j. \end{cases} \qquad (*)$$

Значение $x_{ij} = 0$ в свободной клетке не пишется явно, а вместо этого в ней ставится точка.

А. Метод северо-западного угла

Вычисления осуществляются по формуле (*), начиная с элемента x_{11}, стоящего в северо-западном углу матрицы перевозок.

Замечание. При нахождении начального плана перевозок возможен случай вырождения, когда в результате вычислений значения x_{ij} получается, что потребности в пункте B_j удовлетворены, а запасы в пункте A_i исчерпаны. Тогда одновременно из рассмотрения выбывают строка и столбец. В этом случае рекомендуется поставить в одну из клеток выбывающих строки и столбца (лучше в клетку с наименьшей стоимостью) так называемый *базисный нуль*. Клетка с базисным нулем считается базисной (в ней пишется 0), а общее число базисных клеток остается равным $(m+n-1)$.

Б. Метод минимального элемента

Получаемый методом северо-западного угла начальный план перевозок не зависит от их стоимости и поэтому в общем случае далек от наилучшего. В методе минимального элемента учитываются затраты на перевозку, следовательно, соответствующий начальный план, как правило, позволяет обеспечить меньшую суммарную стоимость, более близкую к оптимальной.

В этом методе по формуле (*) последовательно заполняются клетки с наименьшей стоимостью перевозок. Если имеется несколько клеток с наименьшей стоимостью, то из них выбирается любая.

МЕТОД ПОТЕНЦИАЛОВ

Метод обеспечивает улучшение начального плана перевозок. При этом происходит переход от одного плана перевозок к другому (от одной матрицы перевозок к другой) до тех пор, пока уменьшение суммарной стоимости перевозок станет невозможным.

Введем следующие понятия.

1. *Цикл* – замкнутая ломаная с вершинами в клетках и звеньями, расположенными вдоль строк и столбцов матрицы перевозок. В каждой вершине встречаются два звена, причем одно из них располагается по строке, а другое – по столбцу. Число вершин цикла

четно. Циклом может быть самопересекающаяся ломаная, но точки ее самопересечения не могут быть вершинами цикла.

2. *Означенный цикл* – цикл, в котором некоторой вершине приписан знак «+», а затем при обходе цикла в каком-либо направлении знаки чередуются.

3. *Сдвиг по циклу* на число $\theta \geq 0$. При этом значения x_{ij}, стоящие в положительных вершинах цикла, увеличиваются на число θ, а стоящие в отрицательных вершинах, уменьшаются на число θ.

4. *Потенциалы* – числа $\alpha_i, i = 1,2,\ldots,m;$ $\beta_j, j = 1,2,\ldots,n$. Каждому пункту хранения A_i ставится в соответствие число α_i, пункту потребления B_j – число β_j.

Алгоритм

Шаг 1. Найти начальный план перевозок методом северо-западного угла или методом минимального элемента.

Шаг 2. Для каждой базисной клетки составить уравнение

$$\alpha_i + \beta_j = c_{ij}.$$

Так как эти уравнения образуют систему $(m+n-1)$ уравнений с $(m+n)$ неизвестными (она имеет бесконечное множество решений), то для определенности следует положить $\alpha_1 = 0$. Тогда все остальные потенциалы находятся однозначно.

Шаг 3. Для каждой свободной клетки вычислить относительные оценки:

$$\Delta_{ij} = c_{ij} - (\alpha_i + \beta_j).$$

Шаг 4. Проанализировать относительные оценки:

а) если все относительные оценки неотрицательные, т.е. выполняется условие

$$\Delta_{ij} \geq 0,$$

то задача решена, и следует выписать полученный оптимальный план перевозок из последней матрицы, подсчитать его стоимость;

б) если среди оценок Δ_{ij} есть отрицательные, найти среди них наименьшую отрицательную оценку и пометить знаком $\otimes$.

Шаг 5. Для свободной клетки (i, j) с выбранной оценкой Δ_{ij}, помеченной $\otimes$, построить означенный цикл. Все его вершины, кроме расположенной в клетке (i, j), должны находиться в базисных клетках. Свободная клетка берется со знаком «+».

Шаг 6. Выполнить сдвиг по построенному на шаге 5 циклу на величину θ, равную наименьшему из чисел, стоящих в отрицательных вершинах. При этом числа, стоящие в положительных вершинах, увеличить на θ, а числа, стоящие в отрицательных вершинах, уменьшить на θ.

Если наименьшее значение θ достигается в нескольких отрицательных вершинах цикла, то при сдвиге следует поставить базисный нуль во всех таких вершинах, кроме одной. Тогда число базисных клеток сохранится и будет равно $(m+n-1)$, что необходимо проверять при расчетах. Базисный нуль рекомендуется ставить в клетку (клетки) с наименьшей стоимостью перевозок.

Элементы матрицы, не входящие в цикл, остаются без изменений.

Перейти к шагу 2.

З а м е ч а н и я.

1. При решении задач может возникнуть ситуация, когда $\theta = 0$. Тогда при сдвиге свободная клетка становится базисной (точка заменяется на базисный нуль).

2. Значения суммарной стоимости перевозок при переходе от одной матрицы к другой связаны соотношением

$$f^{k+1} = f^k + \theta \cdot \Delta_{ij},$$

где k – номер итерации, f^k – текущее значение суммарной стоимости перевозок, значения θ и Δ_{ij} находятся на шагах 3 и 6 соответственно.

Пример 1. Решить транспортную задачу, заданную матрицей перевозок (табл. 2).

Таблица 2

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	2	3	4	20
A_2	1	2	5	40
Потребности	10	20	30	60

☐ Решим задачу согласно алгоритму.

Начальный план перевозок методом северо-западного угла найден в табл. 3.

Таблица 3

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	2 10	3 10	4 •	20
A_2	1 •	2 10	5 30	40
Потребности	10	20	30	60

Начнем с северо-западного угла, т.е. $x_{11} = \min[20, 10] = 10$. Тогда в пункте B_1 потребности удовлетворены и, следовательно, $x_{21} = 0$ (в табл. 3 ставится точка). Первый столбец выбывает из рассмотрения.

Продолжим с северо-западного угла, т.е. $x_{12} = \min[(20-10), 20] = \min[10, 20] = 10$. Тогда запасы в пункте A_1 исчерпаны и $x_{13} = 0$ (в табл. 3 ставится точка). При этом первая строка выбывает из рассмотрения.

Продолжим с северо-западного угла:

$$x_{22} = \min[40, (20-10)] = \min[40, 10] = 10.$$

Потребности в пункте B_2 удовлетворены, и второй столбец выбывает из рассмотрения.

Заполним последний элемент, находящийся в северо-западном углу:
$x_{23} = \min[(40-10), 30] = 30$. Таким образом, получен начальный план перевозок:

$$x_{11} = 10, \quad x_{12} = 10, \quad x_{13} = 0,$$

$$x_{21} = 0, \quad x_{22} = 10, \quad x_{23} = 30$$

с суммарной стоимостью $f = 2 \cdot 10 + 3 \cdot 10 + 4 \cdot 0 + 1 \cdot 0 + 2 \cdot 10 + 5 \cdot 30 = 220$. Число базисных клеток, очевидно, составит $m + n - 1 = 2 + 3 - 1 = 4$.

Последовательный переход от матрицы к матрице отображен в табл. 4 – 6.

Таблица 4

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	^{2} 10	^{3} ⊖ 10	^{4} • ⊕	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{1} •	^{2} ⊕ 10	^{5} 30 ⊖	40	$\alpha_2 = -1$
Потребности	10	20	30	60	
	$\beta_1 = 2$	$\beta_2 = 3$	$\beta_3 = 6$		

Получим: $f = 20 + 30 + 20 + 150 = 220$; $\Delta_{13} = c_{13} - (\alpha_1 + \beta_3) = 4 - (0 + 6) = -2 < 0$; $\Delta_{21} = c_{21} - (\alpha_2 + \beta_1) = 1 - (-1 + 2) = 0$. Для клетки (1,3) построим означенный цикл и найдем значение $\theta = \min[10, 30] = 10$. Выполним сдвиг по циклу на число 10.

Таблица 5

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	^{2} ⊖ 10	^{3} •	^{4} 10 ⊕	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{1} ⊕ •	^{2} 20	^{5} 20 ⊖	40	$\alpha_2 = 1$
Потребности	10	20	30	60	
	$\beta_1 = 2$	$\beta_2 = 1$	$\beta_3 = 4$		

Получим: $f = 20 + 40 + 40 + 100 = 200$; $\Delta_{12} = 3 - (0 + 1) = 2 > 0$, $\Delta_{21} = 1 - (1 + 2) = -2 < 0$. Для клетки (2,1) построим означенный цикл и найдем значение $\theta = \min[10, 20] = 10$. Выполним сдвиг по циклу на число 10.

Таблица 6

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	^{2} •	^{3} •	^{4} 20	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{1} 10	^{2} 20	^{5} 10	40	$\alpha_2 = 1$
Потребности	10	20	30	60	
	$\beta_1 = 0$	$\beta_2 = 1$	$\beta_3 = 4$		

Получим: $f = 80 + 10 + 40 + 50 = 180$; $\Delta_{11} = 2 - (0 + 0) = 2 > 0$;

$$\Delta_{12} = 3 - (0 + 1) = 2 > 0.$$

Условие окончания $\Delta_{ij} \geq 0$ выполнено, получен оптимальный план перевозок

$$x_{11} = x_{12} = 0, \quad x_{13} = 20, \; x_{21} = 10, \; x_{22} = 20, \; x_{23} = 10$$

с суммарной стоимостью 180. ■

Задачи с нарушенным балансом

1. Задачи с нарушенным балансом решаются путем сведения к задачам, удовлетворяющим условию баланса. Далее применяется метод потенциалов. Оптимальный план перевозок новой задачи содержит оптимальный план перевозок исходной задачи.

Здесь могут быть два случая.

Первый случай. Суммарные запасы больше суммарных потребностей, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m} a_i > \sum_{j=1}^{n} b_j .$$

В этом случае следует:

1) ввести фиктивный пункт потребления B_{n+1} с потребностью

$$b_{n+1} = \sum_{i=1}^{m} a_i - \sum_{j=1}^{n} b_j ;$$

2) положить стоимости перевозок единицы груза в фиктивный пункт потребления равными нулю: $c_{i,n+1} = 0, \quad i = 1,2,\ldots,m$.

Второй случай. Суммарные запасы меньше суммарных потребностей, т.е.

$$\sum_{i=1}^{m} a_i < \sum_{j=1}^{n} b_j .$$

В данном случае следует:

1) ввести фиктивный пункт хранения A_{m+1} с запасом груза, равным

$$a_{m+1} = \sum_{j=1}^{n} b_j - \sum_{i=1}^{m} a_i ;$$

2) положить стоимости перевозок единицы груза из фиктивного пункта хранения равными нулю: $c_{m+1,j} = 0, \quad j = 1,2,\ldots,n$.

2. В задачах с нарушенным балансом может встречаться дополнительное требование к оптимальному плану перевозок. В первом случае: полностью вывезти продукцию из заданного пункта хранения, а во втором – полностью удовлетворить потребности заданного пункта потребления. В обоих случаях действия при решении аналогичны описанным в п.1, только стоимости перевозок единицы груза для заданных пунктов следует положить равными M, где M – достаточно большое положительное число. Однако следует заметить, что такие задачи могут не иметь решения, например, в следующих случаях:

- суммарные запасы больше суммарных потребностей, требуется полностью вывезти груз из заданного пункта хранения, но запасы в нем превышают суммарные потребности;
- суммарные запасы меньше суммарных потребностей, требуется полностью обеспечить потребности данного пункта потребления, но потребности в нем превышают суммарные запасы.

Пример 2. Решить транспортную задачу, заданную матрицей перевозок (табл. 7).

Таблица 7

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	1	2	3	20
A_2	2	3	3	40
Потребности	30	30	20	80/60

☐ Поставленная задача является задачей с нарушенным балансом. Поскольку суммарные запасы меньше суммарных потребностей, то введем фиктивный пункт хранения A_3 с запасами, равными $80-60=20$ единиц груза. Стоимость перевозок из фиктивного пункта хранения положим равной нулю. В результате перейдем к задаче, в которой выполняется условие баланса.

Начальный план перевозок найдем методом минимального элемента:

$x_{31}=\min[20,30]=20$; $x_{32}=x_{33}=0$ (в табл. 8 здесь и далее ставятся точки);

$$x_{11}=\min[20,(30-20)]=10,\ \ x_{21}=0;$$

$$x_{12}=\min[(20-10),30]=10,\ \ \ x_{13}=0;$$

$$x_{22}=\min[40,(30-10)]=20;\ \ x_{23}=\min[20,(40-20)]=20.$$

Его стоимость составляет $f=10+20+60+60=150$.

Решим полученную задачу методом потенциалов. Результаты решения приведены в табл. 8 –10.

Таблица 8

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	1 ⊕ 10	2 10 ⊝	3 •	20	$\alpha_1=0$
A_2	2 •	3 20	3 20	40	$\alpha_2=1$
A_3	0 ⊝ 20	0 • ⊕	0 •	20	$\alpha_3=-1$
Потребности	30	30	20	80	
	$\beta_1=1$	$\beta_2=2$	$\beta_3=2$		

Получим: $\Delta_{13}=3-(0+2)=1$, $\Delta_{21}=2-(1+1)=0$, $\Delta_{32}=0-(-1+2)=-1\otimes$, $\Delta_{33}=0-(-1+2)=-1$. Для клетки (3,2) построим означенный цикл и найдем значение $\theta=\min[10,20]=10$. Выполним сдвиг по циклу на число $\theta=10$.

Таблица 9

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	1 20	2 •	3 •	20	$\alpha_1=0$
A_2	2 ⊕ •	3 20⊝	3 20	40	$\alpha_2=2$
A_3	0 ⊝ 10	0 10 ⊕	0 •	20	$\alpha_3=-1$
Потребности	30	30	20	80	
	$\beta_1=1$	$\beta_2=1$	$\beta_3=1$		

Получим: $f = 20 + 60 + 60 = 140$; $\Delta_{12} = 2 - (0+1) = 1$, $\Delta_{13} = 3 - (0+1) = 2$, $\Delta_{21} = 2 - (2+1) = -1 \otimes$, $\Delta_{33} = 0 - (-1+1) = 0$. Для клетки (2,1) построим означенный цикл и найдем значение $\theta = \min[10, 20] = 10$. Выполним сдвиг по циклу на число $\theta = 10$.

Таблица 10

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	1 20	2 •	3 •	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	2 10	3 10	3 20	40	$\alpha_2 = 1$
A_3	0 •	0 20	0 •	20	$\alpha_3 = -2$
Потребности	30	30	20	80	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$	$\beta_3 = 2$		

Получим: $f = 20 + 20 + 30 + 60 = 130$; $\Delta_{12} = 2 - (0+2) = 0$, $\Delta_{13} = 3 - (0+2) = 1$,

$$\Delta_{31} = 0 - (-2+1) = 1, \quad \Delta_{33} = 0 - (-2+2) = 0.$$

Поскольку все $\Delta_{ij} \geq 0$, условие окончания выполнено. Оптимальный план перевозок исходной задачи содержится в найденном оптимальном плане:

$$x_{11} = 20,\ x_{12} = x_{13} = 0,\ x_{21} = 10,\ x_{22} = 10,\ x_{23} = 20.$$

Значение $x_{32} = 20$ свидетельствует о том, что в п. B_2 на эту величину не удовлетворены потребности.■

Пример 3. Решить транспортную задачу, заданную матрицей перевозок (табл. 11).

Таблица 11

Пункты	B_1	B_2	Запасы
A_1	9	7	20
A_2	6	9	80
A_3	1	2	20
Потребности	50	20	70/120

□ Так как в поставленной задаче нарушен баланс и суммарные запасы больше суммарных потребностей, то:

1) введем фиктивный пункт потребления B_3 с потребностью, равной $120 - 70 = 50$;

2) положим стоимости перевозки единицы груза в фиктивный пункт потребления равными нулю.

В результате перейдем к задаче, в которой выполняется условие баланса.

Начальный план перевозок найдем методом минимального элемента:

$x_{13} = \min[20, 50] = 20$; $x_{11} = x_{12} = 0$ (в табл. 12 здесь и далее ставятся точки);

$$x_{23} = \min[80, (50-20)] = 30, \quad x_{33} = 0;$$

$$x_{31} = \min[20, 50] = 20, \quad x_{32} = 0;$$

$$x_{21} = \min[(80-30), (50-20)] = 30;$$

$$x_{22} = \min[20, 20] = 20.$$

Его стоимость составляет $f = 180 + 180 + 20 = 380$.

Решим полученную задачу методом потенциалов. Результаты решения приведены в табл. 12–13.

Таблица 12

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	^{9} •	^{7} ⊕ •	^{0} 20 ⊖	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{6} 30	^{9} ⊖ 20	^{0} 30 ⊕	80	$\alpha_2 = 0$
A_3	^{1} 20	^{2} •	^{0} •	20	$\alpha_3 = -5$
Потребности	50	20	50	120	

$\beta_1 = 6$ $\quad \beta_2 = 9$ $\quad \beta_3 = 0$

Получим: $\Delta_{11} = 3 - (0+6) = 3$, $\quad \Delta_{12} = 7 - (0+9) = -2$, ⊗

$\Delta_{32} = 2 - (-5+9) = -2$, $\quad \Delta_{33} = 0 - (-1+2) = -1$.

Для клетки (1,2) построим означенный цикл и найдем значение $\theta = \min[20, 20] = 20$. Выполним сдвиг по циклу на число $\theta = 20$. Поскольку наименьшее значение $\theta = 20$ достигается сразу в двух отрицательных клетках, то согласно шагу 6 алгоритма в одной из этих клеток ставится базисный нуль (выбрана клетка (1,3) с наименьшей стоимостью).

Таблица 13

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	^{9} •	^{7} 20	^{0} 0	20	$\alpha_1 = 0$
A_2	^{6} 30	^{9} •	^{0} 50	80	$\alpha_2 = 0$
A_3	^{1} 20	^{2} •	^{0} •	20	$\alpha_3 = -5$
Потребности	50	20	50	120	

$\beta_1 = 6$ $\quad \beta_2 = 7$ $\quad \beta_3 = 0$

Получим: $\Delta_{11} = 3 - (0+6) = 3$, $\quad \Delta_{22} = 9 - (0+7) = 2$,

$\Delta_{32} = 2 - (-5+7) = 0$, $\quad \Delta_{33} = 0 - (-5+0) = 5$, $\quad f = 140 + 180 + 20 = 340$.

Поскольку $\Delta_{ij} \geq 0$, условие окончания выполнено. Оптимальный план перевозок исходной задачи содержится в найденном оптимальном плане:

$$x_{11} = 0,\ x_{12} = 20,\ x_{21} = 30,\ x_{22} = 0,\ x_{31} = 20,\ x_{32} = 0.$$

Значение $x_{23} = 50$ свидетельствует о том, что в п. A_2 остается неперевезенным груз в количестве 50 единиц.■

Пример 4. Решить транспортную задачу, заданную матрицей перевозок (табл. 14), при дополнительном требовании полного вывоза груза из п. A_2.

Таблица 14

Пункты	B_1	B_2	Запасы
A_1	1	2	25
A_2	3	4	15
Потребности	10	20	30/40

□ Так как в поставленной задаче нарушен баланс и суммарные запасы больше суммарных потребностей, то:

1) введем фиктивный пункт потребления B_3 с потребностью, равной $40 - 30 = 10$;

2) положим стоимости перевозки единицы груза в фиктивный пункт потребления равными: $c_{13} = 0$ (из пункта A_1), $c_{23} = M$ (из пункта A_2, из которого требуется обеспечить полный вывоз груза).

В результате получим задачу, удовлетворяющую условию баланса. Решим ее методом потенциалов. Начальный план перевозок найдем методом северо-западного угла (табл. 15). Последовательный переход от матрицы к матрице приведен в табл. 15 и 16.

Таблица 15

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	1 10	2 $\ominus$15	0 • $\oplus$	25	$\alpha_1 = 0$
A_2	3 •	4 $\oplus$5	M 10 $\ominus$	15	$\alpha_2 = 2$
Потребности	10	20	10	40	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$	$\beta_3 = M - 2$		

Получим: $\Delta_{13} = 0 - (0 + M - 2) = -M + 2 < 0$ $\otimes$ (поскольку M – достаточно большое положительное число), $\Delta_{21} = 3 - (2 + 1) = 0$. Для клетки (1,3) построим означенный цикл и найдем значение $\theta = \min\,[10, 15] = 10$. Выполним сдвиг по циклу на число $\theta = 10$.

Таблица 16

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы	
A_1	1 10	2 5	0 10	25	$\alpha_1 = 0$
A_2	3 •	4 15	M •	15	$\alpha_2 = 2$
Потребности	10	20	10	40	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$	$\beta_3 = 0$		

Получим: $\Delta_{21} = 3 - (2 + 1) = 0$, $\Delta_{23} = M - (2 + 0) = M - 2 > 0$ (поскольку M – достаточно большое положительное число). Условие окончания $\Delta_{ij} \geq 0$ выполнено, решение исходной задачи содержится в оптимальном плане решенной задачи: $x_{11} = 10, x_{12} = 5, x_{21} = 0, x_{22} = 15$. Очевидно, из пункта A_2 весь груз вывозится, а значение $x_{13} = 10$ свидетельствует об остающемся грузе в пункте A_1. ■

Пример 5. Решить транспортную задачу, заданную матрицей перевозок (табл. 17), при дополнительном требовании полного удовлетворения потребностей в п. B_1.

Таблица 17

Пункты	B_1	B_2	Запасы
A_1	1	2	10
A_2	3	4	20
Потребности	25	15	40/30

☐ Так как в поставленной задаче нарушен баланс и суммарные запасы меньше суммарных потребностей, то:

1) введем фиктивный пункт хранения A_3 с запасами, равными $40 - 30 = 10$;

2) положим стоимости перевозки единицы груза из фиктивного пункта хранения равными: $c_{11} = M$ (в пункт B_1, потребности которого должны быть полностью удовлетворены), $c_{21} = 0$ (в пункт B_2).

В результате получим задачу, удовлетворяющую условию баланса. Решим ее методом потенциалов. Начальный план перевозок найдем методом минимального элемента (табл. 18).

Таблица 18

Пункты	B_1	B_2	Запасы	
A_1	1 10	2 •	10	$\alpha_1 = 0$
A_2	3 15	4 5	20	$\alpha_2 = 2$
A_3	M •	0 10	10	$\alpha_3 = -2$
Потребности	25	15	40	
	$\beta_1 = 1$	$\beta_2 = 2$		

Результаты нахождения начального плана перевозок методом минимального элемента:

$$x_{32} = \min[10, 15] = 10,\ x_{31} = 0;\ \ x_{11} = \min[10, 25] = 10,\ x_{12} = 0;$$

$$x_{21} = \min[20, (25-10)] = 15; \qquad x_{22} = \min[(20-15), (15-10)] = 5.$$

Его стоимость $f = 10 + 45 + 20 = 75$. Далее получим: $\Delta_{12} = 2 - (0+2) = 0$, $\Delta_{31} = M - (-2+1) = M + 1$. Поскольку M – достаточно большое положительное число, то условие окончания $\Delta_{ij} \geq 0$ выполнено, решение исходной задачи содержится в оптимальном плане решенной задачи: $x_{11} = 10,\ x_{12} = 0,\ x_{21} = 15,\ x_{22} = 5$. Очевидно, в пункте B_1 потребности полностью удовлетворены, а значение $x_{32} = 10$ свидетельствует о том, что в п. B_2 на эту величину потребности не удовлетворены.■

Занятие 10. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается проблема решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), записываемых в виде

$$Ax = b \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

где $A = (a_{ij}) \in R^{n \times n}$ – действительная матрица размеров $(n \times n)$, i, j – переменные, соответствующие номерам строк и столбцов (целые числа); $b = (b_1, \ldots, b_n)^T \in R^n$ – вектор-столбец размеров $(n \times 1)$, $x = (x_1, \ldots, x_n)^T \in R^n$ – вектор-столбец неизвестных, R^n – n-мерное евклидово пространство, верхний индекс "T" здесь и далее обозначает операцию транспонирования.

Требуется найти решение $x_* = (x_{*1}, \ldots, x_{*n})^T \in R^n$ системы, подстановка которого в систему приводит к верному равенству $A\,x_* = b$.

А. МЕТОД ПРОСТЫХ ИТЕРАЦИЙ

Методика решения задачи

Шаг 1. Преобразовать систему $Ax = b$ к виду $x = \alpha x + \beta$ одним из описанных способов.

Шаг 2. Задать начальное приближение решения $x^{(0)}$ произвольно или положить $x^{(0)} = \beta$, а также малое положительное число ε (точность). Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить следующее приближение $x^{(k+1)}$ по формуле

$$x^{(k+1)} = \alpha x^{(k)} + \beta\ .$$

Шаг 4. Если выполнено условие окончания $\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon$, процесс завершить и положить $x_* \cong x^{(k+1)}$. Иначе положить $k = k + 1$ и перейти к п.3.

Пример 1. Методом простых итераций с точностью $\varepsilon = 0{,}01$ решить систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 + 10x_3 &= 14, \\ 10x_1 + x_2 + x_3 &= 12, \\ 2x_1 + 10x_2 + x_3 &= 13. \end{aligned}$$

□ 1. Так как $|2| < |2| + |10|$, $|1| < |10| + |1|$, $|1| < |2| + |10|$, условие преобладания диагональных элементов не выполняется. Переставим уравнения местами так, чтобы выполнялось условие преобладания диагональных элементов:

$$\begin{aligned} 10x_1 + x_2 + x_3 &= 12, \\ 2x_1 + 10x_2 + x_3 &= 13, \\ 2x_1 + 2x_2 + 10x_3 &= 14. \end{aligned}$$

Получаем $|10| > |1| + |1|$, $|10| > |2| + |1|$, $|10| > |2| + |2|$. Выразим из первого уравнения x_1, из второго x_2, из третьего x_3:

$$\begin{aligned} x_1 &= -0{,}1 \cdot x_2 - 0{,}1 \cdot x_3 + 1{,}2, \\ x_2 &= -0{,}2 \cdot x_1 - 0{,}1 \cdot x_3 + 1{,}3, \\ x_3 &= -0{,}2 \cdot x_1 - 0{,}2 \cdot x_2 + 1{,}4; \end{aligned} \qquad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & -0{,}1 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & 0 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & -0{,}2 & 0 \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} 1{,}2 \\ 1{,}3 \\ 1{,}4 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что $\|\alpha\|_1 = \max\{0{,}2; 0{,}3; 0{,}4\} = 0{,}4 < 1$, следовательно, условие сходимости (теорема) выполнено.

2. Зададим $x^{(0)} = \beta = \begin{pmatrix} 1{,}2 \\ 1{,}3 \\ 1{,}4 \end{pmatrix}$. В поставленной задаче $\varepsilon = 0{,}01$.

3. Выполним расчеты по формуле $x^{(k+1)} = \alpha x^{(k)} + \beta$:

$$x^{(k+1)} = \begin{pmatrix} 0 & -0{,}1 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & 0 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & -0{,}2 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1{,}2 \\ 1{,}3 \\ 1{,}4 \end{pmatrix}, \quad k = 0,1,\ldots,$$

или

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= -0{,}1x_2^{(k)} - 0{,}1x_3^{(k)} + 1{,}2; \\ x_2^{(k+1)} &= -0{,}2x_1^{(k)} - 0{,}1x_3^{(k)} + 1{,}3; \quad k = 0,1,\ldots, \\ x_3^{(k+1)} &= -0{,}2x_1^{(k)} - 0{,}2x_2^{(k)} + 1{,}4; \end{aligned}$$

до выполнения условия окончания и результаты занесем в табл. 1.

Таблица 1

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_1$
0	1,2000	1,3000	1,4000	-
1	0,9300	0,9200	0,900	0,5
2	1,0180	1,0240	1,0300	0,13
3	0,9946	0,9934	0,9916	0,0384
4	1,0015	1,0020	1,0024	0,0108
5	0,9996	0,9995	0,9993	0,0027<ε

4. Расчет закончен, поскольку условие окончания $\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| = 0{,}0027 < \varepsilon$ выполнено.

Приближенное решение задачи: $x_* \cong (0{,}9996\,;0{,}9995\,;0{,}9993)^T$. Очевидно, точное решение: $x_* = (1\,;1\,;1)^T$.

Б. МЕТОД ЗЕЙДЕЛЯ

Методика решения задачи

Шаг 1. Преобразовать систему $Ax = b$ к виду $x = \alpha x + \beta$ одним из описанных способов.

Шаг 2. Задать начальное приближение решения $x^{(0)}$ произвольно или положить $x^{(0)} = \beta$, а также малое положительное число ε (точность). Положить $k = 0$.

Шаг 3. Произвести расчеты по формуле

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \alpha_{11}x_1^{(k)} + \alpha_{12}x_2^{(k)} + \alpha_{13}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{1n}x_n^{(k)} + \beta_1,\\
x_2^{(k+1)} &= \alpha_{21}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{22}x_2^{(k)} + \alpha_{23}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{2n}x_n^{(k)} + \beta_2,\\
x_3^{(k+1)} &= \alpha_{31}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{32}\boxed{x_2^{(k+1)}} + \alpha_{33}x_3^{(k)} + \ldots + \alpha_{3n}x_n^{(k)} + \beta_3,\\
&\vdots\\
x_n^{(k+1)} &= \alpha_{n1}\boxed{x_1^{(k+1)}} + \alpha_{n2}\boxed{x_2^{(k+1)}} + \alpha_{n3}\boxed{x_3^{(k+1)}} + \ldots + \alpha_{nn-1}\boxed{x_{n-1}^{(k+1)}} + \alpha_{nn}x_n^{(k)} + \beta_n.
\end{aligned} \tag{*}
$$

(в каждое последующее уравнение подставляются значения неизвестных, полученных из предыдущих уравнений, что показано в записи стрелками)
или

$$x^{(k+1)} = Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} + \beta,$$

где L, U являются разложениями матрицы α:

$$
L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ \alpha_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0\\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & 0 & \cdots & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \qquad
U = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \cdots & \alpha_{1n}\\ 0 & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2n}\\ 0 & 0 & \alpha_{33} & \cdots & \alpha_{3n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}.
$$

и найти $x^{(k+1)}$.

Шаг 4. Если выполнено условие окончания $\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon$, процесс завершить и положить $x_* \cong x^{(k+1)}$. Иначе положить $k = k + 1$ и перейти к п.3.

Пример 2. Методом Зейделя с точностью $\varepsilon = 0{,}001$ решить систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 + 10x_3 &= 14, \\ 10x_1 + x_2 + x_3 &= 12, \\ 2x_1 + 10x_2 + x_3 &= 13. \end{aligned}$$

□ 1. Приведем систему $Ax = b$ к виду $x = \alpha x + \beta$ так же, как в примере 1:

$$\begin{aligned} x_1 &= -0{,}1 \cdot x_2 - 0{,}1 \cdot x_3 + 1{,}2, \\ x_2 &= -0{,}2 \cdot x_1 - 0{,}1 \cdot x_3 + 1{,}3, \\ x_3 &= -0{,}2 \cdot x_1 - 0{,}2 \cdot x_2 + 1{,}4; \end{aligned} \qquad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & -0{,}1 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & 0 & -0{,}1 \\ -0{,}2 & -0{,}2 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \beta = \begin{pmatrix} 1{,}2 \\ 1{,}3 \\ 1{,}4 \end{pmatrix}.$$

Так как $\|\alpha\|_1 = \max\{0{,}2; 0{,}3; 0{,}4\} = 0{,}4 < 1$, условие сходимости выполняется.

2. Зададим $x^{(0)} = (1{,}2; 0; 0)^T$. В поставленной задаче $\varepsilon = 0{,}001$.

3. Выполним расчеты по формуле (*):

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= -0{,}1 x_2^{(k)} - 0{,}1 x_3^{(k)} + 1{,}2; \\ x_2^{(k+1)} &= -0{,}2 x_1^{(k+1)} - 0{,}1 x_3^{(k)} + 1{,}3; \qquad k = 0,1,\ldots, \\ x_3^{(k+1)} &= -0{,}2 x_1^{(k+1)} - 0{,}2 x_2^{(k+1)} + 1{,}4; \end{aligned}$$

и результаты занесем в табл. 2.

Таблица 2

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_1$
0	1,2000	0	0	-
1	1,2000	1,0600	0,9480	1,0600
2	0,9992	1,0054	0,9991	0,1008
3	0,9996	1,0002	1,0000	0,0052
4	1,0000	1,0000	1,0000	0,0004<ε

Очевидно, найденное решение $x_* = (1;1;1)^T$ является точным.

4. Расчет завершен, поскольку условие окончания $\left\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right\| = 0{,}0004 < \varepsilon$ выполнено.■

Занятие 11. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть дано нелинейное уравнение

$$f(x) = 0\,, \qquad (*)$$

где $f(x)$ – функция, определенная и непрерывная на некотором промежутке.

Этапы решения нелинейных уравнений

Первый этап. Находятся отрезки $[a_i, b_i]$, внутри каждого из которых содержится один простой или кратный корень ($x_{*i} \in [a_i, b_i]$). Этот этап называется процедурой *отделения корней*. По сути, на нем осуществляется грубое нахождение корней x_{*i}.

Второй этап. Грубое значение каждого корня x_{*i} уточняется до заданной точности одним из численных методов, в которых реализуются последовательные приближения.

А. МЕТОД ПРОСТЫХ ИТЕРАЦИЙ

Методика решения задачи

Шаг 1. Уравнение $f(x) = 0$ равносильным преобразованием привести к виду $x = \varphi(x)$. Это преобразование может быть осуществлено различными путями, но для сходимости нужно обеспечить выполнение условия $\left|\varphi'(x)\right| \le \chi < 1$ (χ – некоторая константа). При этом задача сводится к нахождению абсциссы точки пересечения прямой $y = x$ и кривой $y = \varphi(x)$ (рис. 1).

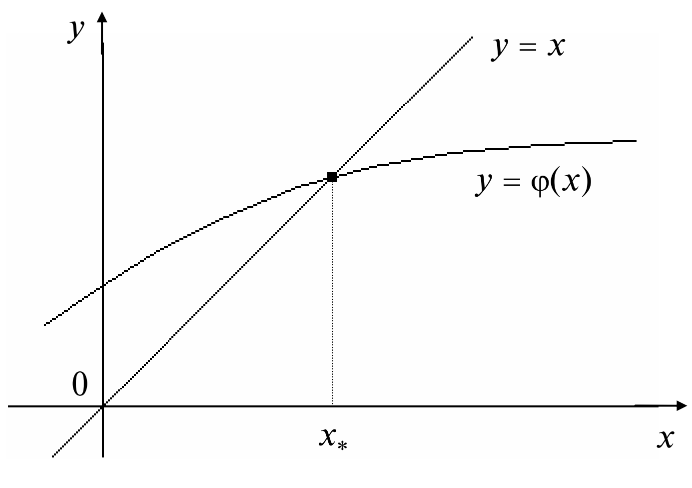


Рис. 1

Шаг 2. Задать начальное приближение $x^{(0)} \in [a,b]$ и малое положительное число ε. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить следующее приближение:

$$x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}).$$

Шаг 4. Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| \le \varepsilon$, итерации завершаются и $x_* \cong x^{(k+1)}$. Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| > \varepsilon$, положить $k = k+1$ и перейти к п.3.

Способы преобразования уравнения

Преобразование уравнения $f(x) = 0$ к равносильному виду $x = \varphi(x)$ может быть выполнено неоднозначно.

1. Можно заменить уравнение $f(x) = 0$ на равносильное $x = x + cf(x)$, где $c = \text{const} \ne 0$. Тогда, принимая правую часть этого уравнения за $\varphi(x)$ и раскрывая $|\varphi'(x)| = |1 + cf'(x)| < 1$, получаем условие $-2 < cf'(x) < 0$.

2. Можно выразить x из уравнения $f(x) = 0$ так, чтобы для полученного уравнения $x = \varphi(x)$ выполнялось условие сходимости $|\varphi'(x)| < 1$ в окрестности искомого корня.

Пример 1. Найти решение уравнения $x^3 - x + 1 = 0$ методом простых итераций с точностью $\varepsilon_1 = 0{,}01$ и $\varepsilon_2 = 0{,}001$.

☐ I. Отделим корень уравнения. Уравнение имеет три корня, среди которых по крайней мере один действительный, поскольку это уравнение нечетной степени.

Преобразуем уравнение к равносильному виду: $x^3 = x - 1$ и найдем точки пересечения графиков $y = x^3$ и $y = x - 1$ (рис. 2).

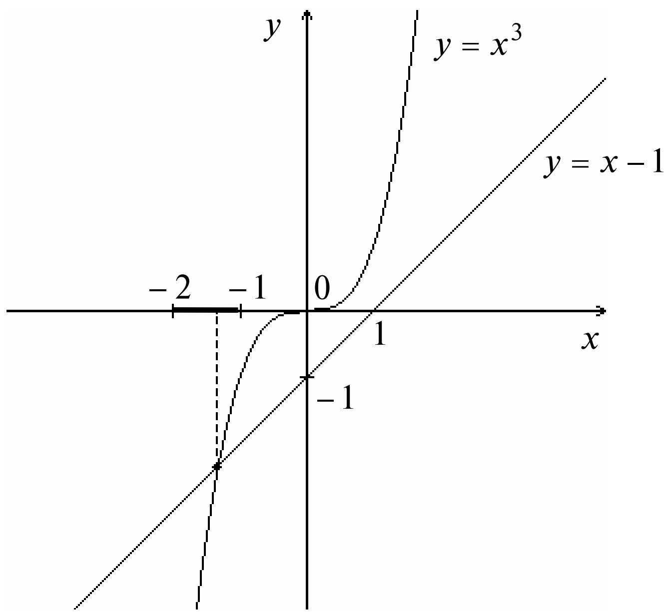


Рис. 2

Очевидно, корень уравнения $x_* \in [-2; -1]$.

II. Преобразуем уравнение к виду $x = \varphi(x)$. Для этого запишем его сначала в форме $x = x^3 + 1$. Легко показать, что функция $\varphi(x) = x^3 + 1$ не удовлетворяет условию сходимости, поскольку $\varphi'(x) = 3x^2$, $\varphi'(-2) = 12 > 1$, $\varphi'(-1) = 3 > 1$. Поэтому воспользуемся другим преобразованием.

В результате получим $x = \sqrt[3]{x-1}$. Можно проверить, что $|\varphi'(x)| < 1$ на отрезке $[-2; -1]$, т.е. достаточные условия сходимости выполняются.

2. Зададим начальное приближение $x^{(0)} = -1$. Решим задачу с различной точностью ε_1 и ε_2 .

3,4. Выполним расчеты по формуле:

$$x^{(k+1)} = \sqrt[3]{x^{(k)} - 1}, \; k = 0,1,2,...$$

Результаты расчетов приведены в табл. 1.

Таблица 1

k	0	1	2	3	4	5
$x^{(k)}$	-1,000	-1,2599	-1,3123	-1,3223	-1,3243	-1,3246
$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$	-	0,2599	0,0524	0,0100	0,0020	0,0003

Если $\varepsilon_1 = 0{,}01$, то $x_* \cong -1{,}3223$, а если $\varepsilon_2 = 0{,}001$, то $x_* \cong -1{,}3246$.■

Пример 2. Найти корни уравнения $x^3 - x^2 - 9x + 9 = 0$ методом простых итераций с точностью $\varepsilon = 0{,}001$.

□ I. Отделить корни уравнения $x^3 - x^2 - 9x + 9 = 0$. Уравнение имеет три корня, среди которых по крайней мере один действительный.

Преобразуем уравнение к равносильному виду: $x^3 = x^2 + 9x - 9$. Найдем абсциссы точек пересечения графиков $y = x^3$ и $y = x^2 + 9x - 9$ (на рис. 2 указаны два из трех полученных промежутков).

Результат отделения корней – три промежутка $[0{,}5; 2]$, $[2; 4]$, $[-4; -2]$. Заметим, что отрезки могут быть сужены, например, вместо отрезка $[2; 4]$ можно принять $[2{,}5; 4]$.

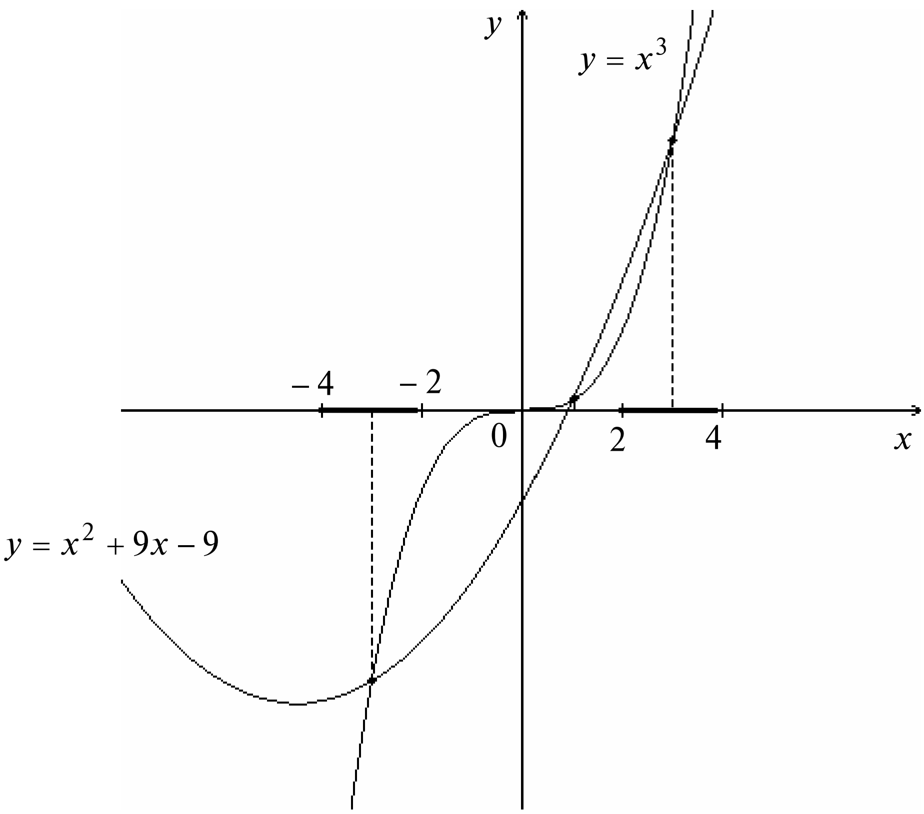


Рис. 3

II. Преобразуем уравнение к виду $x = \varphi(x)$: $x = \sqrt[3]{x^2 + 9x - 9}$.

Можно показать, что на отрезках $[2; 4]$, $[-4; -2]$ функция $\varphi(x) = \sqrt[3]{x^2 + 9x - 9}$ удовлетворяет условию $|\varphi'(x)| < 1$. На отрезке $[0{,}5; 2]$ используем другой вид уравнения: $x = \frac{x^3}{9} - \frac{x^2}{9} + 1$. Также легко проверить, что функция $\varphi(x) = \frac{x^3}{9} - \frac{x^2}{9} + 1$ удовлетворяет достаточному условию сходимости на отрезке $[0{,}5; 2]$.

2. В качестве начальных приближений выберем:

– точку $x^{(0)} = -2$ на отрезке $[-4; -2]$;

– точку $x^{(0)} = 0{,}5$ на отрезке $[0{,}5; 2]$;

– точку $x^{(0)} = 2$ на отрезке $[2; 4]$.

В поставленной задаче $\varepsilon = 0{,}001$.

3,4. Выполним расчеты по формуле

$$x^{(k+1)} = \sqrt[3]{\left(x^{(k)}\right)^2 + 9x^{(k)} - 9}, \ k = 0,1,2,\dots,$$

с начальными значениями $x^{(0)} = -2$ и $x^{(0)} = 2$ и по формуле

$$x^{(k+1)} = \frac{\left(x^{(k)}\right)^3}{9} - \frac{\left(x^{(k)}\right)^2}{9} + 1, \ k = 0,1,2,\dots,$$

с начальным значением $x^{(0)} = 0{,}5$. Результаты расчетов занесены в табл. 2-4.

Таблица 2

k	$x^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$
0	2,0000	-
1	2,3513	0,3513
2	2,6056	0,2543
3	2,7694	0,1638
4	2,8682	0,0988
5	2,9255	0,0573
6	2,9582	0,0327
7	2,9767	0,0185
8	2,9870	0,0102
9	2,9927	0,0057
10	2,9959	0,0032
11	2,9977	0,0018
12	2,9987	0,0010

Таблица 3

k	$x^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$
0	-2,0000	-
1	-2,8438	0,8438
2	-2,9816	0,1378
3	-2,9979	0,0163
4	-2,9997	0,0018
5	-2,99997	0,00027

Таблица 4

k	$x^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$
0	0,50000	-
1	0,98611	0,4861
2	0,99849	0,01238
3	0,99983	0,00134
4	0,99998	0,00015

В результате получены приближенные значения корней: $x_{1*} \cong -2{,}99997$, $x_{2*} \cong 0{,}99998$, $x_{3*} \cong 2{,}9987$.

Обратим внимание на сильное различие в числе итераций, потребовавшихся для нахождения корней $x_* = 3$ (табл. 2) и $x_* = -3$ (табл. 3), с помощью одной и той же формулы. Заметим, что в окрестности корня $x_* = 3$ значения модуля производной функции $\varphi(x) = \sqrt[3]{x^2 + 9x - 9}$ равны: $|\varphi'(2)| = 0{,}784$; $|\varphi'(2{,}3513)| = 0{,}673$; $|\varphi'(2{,}6056)| = 0{,}618$; $|\varphi'(2{,}9977)| = 0{,}556$. С другой стороны, в окрестности корня $x_* = -3$ имеем: $|\varphi'(-2)| = 0{,}206$; $|\varphi'(-2{,}8438)| = 0{,}124$; $|\varphi'(-2{,}9977)| = 0{,}111$. Анализ результатов показывает, что чем меньше значения модуля производной $|\varphi'(x)|$, тем быстрее сходимость. ■

Б. МЕТОД НЬЮТОНА

Метод Ньютона (*метод касательных*) является одним из наиболее популярных численных методов. Он реализуется по формуле:

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

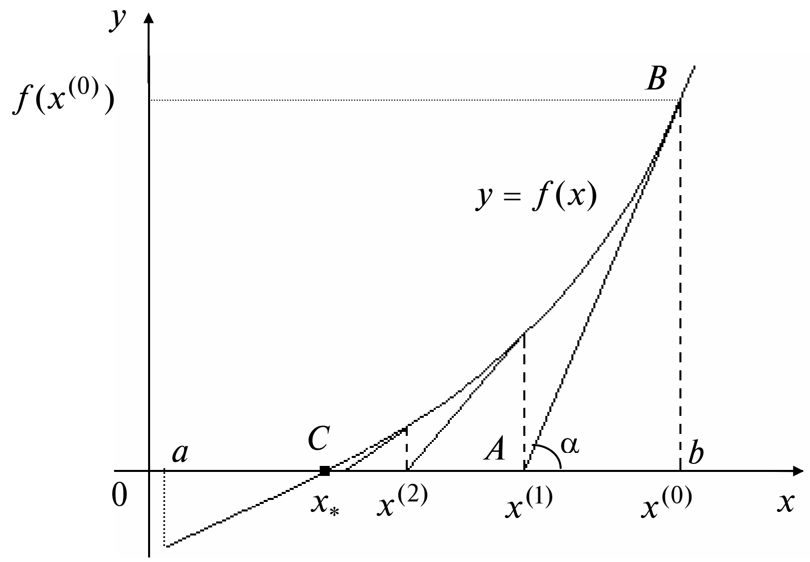


Рис. 4

В точке $x^{(0)}$ строится касательная к графику функции. Следующей точкой $x^{(1)}$ является точка пересечения касательной с осью абсцисс. Далее процесс продолжается аналогично.

Теорема (о достаточных условиях сходимости метода Ньютона).

Пусть выполняются следующие условия:

1. Функция $f(x)$ *определена и дважды дифференцируема на* $[a,b]$.

2. Отрезку $[a,b]$ *принадлежит только один простой корень* x_*, *так что* $f(a)\cdot f(b) < 0$.

3. Производные $f'(x), f''(x)$ *на* $[a,b]$ *сохраняют знак, и* $f'(x) \neq 0$.

4. Начальное приближение $x^{(0)}$ *удовлетворяет неравенству* $f(x^{(0)})\cdot f''(x^{(0)}) > 0$ *(знаки функций* $f(x)$ *и* $f''(x)$ *в точке* $x^{(0)}$ *совпадают).*

Тогда с помощью метода Ньютона можно вычислить корень уравнения $f(x) = 0$ *с любой точностью.*

Методика решения задачи

Шаг 1. Задать начальное приближение $x^{(0)}$ так, чтобы выполнялось неравенство $f(x^{(0)}) \cdot f''(x^{(0)}) > 0$, а также малое положительное число ε. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Вычислить $x^{(k+1)}$ по формуле

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}.$$

Шаг 3. Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| \le \varepsilon$, процесс завершить и положить $x_* \cong x^{(k+1)}$.

Если $\left|x^{(k+1)} - x^{(k)}\right| > \varepsilon$, положить $k = k + 1$ и перейти к п.2.

Пример 3. Методом Ньютона найти корень уравнения $x^3 - x + 1 = 0$.

□ В примере 1 корень был отделен: $x_* \in [-2; -1]$.

1. Зададим начальное приближение $x^{(0)}$. Так как $f'(x) = 3x^2 - 1$, $f''(x) = 6x$, то $f(-2) = -5$, $f''(x) < 0$ при $x \in [-2; -1]$. Поэтому $f(-2)f''(-2) > 0$ и $x^{(0)} = -2$. Положим $\varepsilon = 0{,}001$.

2,3. Результаты расчетов по формуле:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\left(x^{(k)}\right)^3 - x^{(k)} + 1}{3\left(x^{(k)}\right)^2 - 1},\ k = 0,1,\ldots,$$

приведены в табл. 5.

Таблица 5

k	0	1	2	3	4	5
$x^{(k)}$	-2,0000	-1,545455	-1,359615	-1,325801	-1,324719	-1,324718
$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$	-	0,454545	0,185840	0,033814	0,001082	0,000001

Найденное приближенное решение $x_* \cong -1{,}32472$. ■

Пример 4. Найти корни уравнения

$$x^3 - x^2 - 9x + 9 = 0$$

методом Ньютона с точностью $\varepsilon = 0{,}001$.

□ Процедура отделения корней была выполнена в примере 2. В качестве отрезков $[a_i, b_i]$, которым принадлежат корни уравнения, выберем $[-4; -2]$, $[2{,}5; 4]$, $[0{,}5; 2]$.

Так как $f(-4) = -3{,}5$; $f(-2) = 15$, т.е. $f(-4)f(-2) < 0$, производные $f''(x) = 6x - 2 < 0$, $f'(x) = 3x^2 - 2x - 9 > 0$ сохраняют знак при $x \in [-4; -2]$, то условия сходимости выполняются.

Так как $f(2{,}5) = -4{,}125$; $f(4) = 21$, т.е. $f(2{,}5)f(4) < 0$, и производные $f'(x) > 0$, $f''(x) > 0$ сохраняют знак при $x \in [2{,}5;\ 4]$, то условия сходимости на этом отрезке тоже выполняются.

Так как $f(0{,}5) = 4{,}375$; $f(2) = -5$, т.е. $f(0{,}5)f(2) < 0$, и производные $f'(x) < 0$, $f''(x) > 0$ сохраняют знак при $x \in [0{,}5;\ 2]$, то условия сходимости выполняются.

1. Зададим начальные приближения: на отрезке [0,5; 2] выберем $x^{(0)} = 0{,}5$, так как $f(0{,}5) \cdot f''(0{,}5) > 0$; на отрезке $[-4, -2]$ выберем $x^{(0)} = -4$, так как $f(4) \cdot f''(4) > 0$; аналогично на отрезке $[2{,}5;\ 4]$ выберем $x^{(0)} = 4$. В поставленной задаче $\varepsilon = 0{,}001$.

2,3. Результаты расчетов по формуле:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\left(x^{(k)}\right)^3 - \left(x^{(k)}\right)^2 - 9x^{(k)} + 9}{3\left(x^{(k)}\right)^2 - 2x^{(k)} - 9}, \quad k = 0,1,\ldots,$$

приведены в табл. 6–8.

Таблица 6

k	0	1	2	3	4
$x^{(k)}$	- 4,00000	-3,255319	-3,023383	-3,000225	-3,000000
$\left\lvert x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\rvert$	-	0,744681	0,231936	0,023158	0,000225

Таблица 7

k	0	1	2	3
$x^{(k)}$	0,5000	0,972973	0,9998246	1,0000000
$\left\lvert x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\rvert$	-	0,472973	0,0268516	0,0001754

Таблица 8

k	0	1	2	3	4	5
$x^{(k)}$	4,0000	3,322581	3,051484	3,001674	3,000002	3,0000
$\left\lvert x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\rvert$	-	0,6774194	0,2710969	0,049809	0,001671	$2 \cdot 10^{-6}$

В результате получены приближенные значения корней: $x_{*1} \cong -3{,}0000$; $x_{*2} \cong 1{,}0000$; $x_{*3} \cong 3{,}0000$. ■

В. МЕТОД ПОЛОВИННОГО ДЕЛЕНИЯ

Методика решения задачи

Шаг 1. Найти начальный интервал неопределенности $L_0 = [a_0, b_0]$ одним из методов отделения корней, задать малое положительное число ε. Положить $k = 0$.

Шаг 2. Найти середину текущего интервала неопределенности:

$$c_k = \frac{a_k + b_k}{2} .$$

Шаг 3. Если $f(a_k) \cdot f(c_k) < 0$, то положить $a_{k+1} = a_k$, $b_{k+1} = c_k$, а если $f(c_k) \cdot f(b_k) < 0$, то принять $a_{k+1} = c_k$, $b_{k+1} = b_k$. В результате находится текущий интервал неопределенности $L_{k+1} = [a_{k+1}, b_{k+1}]$.

Шаг 4. Если $b_{k+1} - a_{k+1} \le \varepsilon$, то процесс завершить: $x_* \in L_{k+1} = [a_{k+1}, b_{k+1}]$. Приближенное значение корня можно найти по формуле $x_* \cong \dfrac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$.

Если $b_{k+1} - a_{k+1} > \varepsilon$, положить $k = k + 1$ и перейти к п.2.

Пример 5. Найти корень уравнения $x^3 - x + 1 = 0$ методом половинного деления с точностью $\varepsilon_1 = 0{,}01$ и $\varepsilon_2 = 0{,}0005$.

☐ I. Результат отделения корня уравнения $x_* \in [-2; -1]$, поэтому $a_0 = -2$, $b_0 = -1$.

II. Функция непрерывна на отрезке $[-2; -1]$, имеет единственный простой корень. На концах отрезка функция имеет значения $f(-2) = -5$, $f(-1) = 1$, противоположные по знаку. Результаты расчетов приведены в табл. 9.

Таблица 9

k	$f(a_k)$	a_k	b_k	$f(b_k)$	$c_k = \dfrac{a_k + b_k}{2}$	$f(c_k)$	$b_k - a_k$
0	-5	-2	-1	1	-1,5	-0,875	1
1	-0,875	-1,5	-1	1	-1,25	0,2965	0,5
2	-0,875	-1,5	-1,25	0,2965	-1,375	-0,224	0,25
3	-0,224	-1,375	-1,25	0,2965	-1,3125	0,05	0,125
4	-0,224	-1,375	-1,3125	0,05	-1,34375	-0,08	0,0625
5	-0,08	-1,34375	-1,3125	0,05	-1,3282	-0,015	0,03125
6	-0,015	-1,3282	-1,3125	0,05	-1,3204	0,018	0,0156
7	-0,015	-1,3282	-1,3204	0,018	-1,3243	0,0018	0,00781
8	-0,015	-1,3282	-1,3243	0,0018	-1,3263	-0,007	0,0039
9	-0,007	-1,3263	-1,3243	0,0018	-1,3253	-0,0025	0,002
10	-0,0025	-1,3253	-1,3243	0,0018	-1,3248	-0,0003	0,001
11	-0,0003	-1,3248	-1,3243	0,0018	-	-	0,0005

Если $\varepsilon_1 = 0{,}01$, корень $x_* \in [-1{,}3282;\ -1{,}3204]$, а если $\varepsilon_2 = 0{,}0005$ – корень $x_* \in [-1{,}3248;\ -1{,}3243]$ или $x_* \cong \dfrac{-1{,}3282-1{,}3204}{2} = -1{,}3243$ при $\varepsilon_1 = 0{,}01$;

$x_* \cong \dfrac{-1{,}3248-1{,}3243}{2} = -1{,}3245$ при $\varepsilon_2 = 0{,}0005$. ■

Пример 6. Найти корень уравнения $x^3 - x^2 - 9x + 9 = 0$ методом половинного деления с точностью $\varepsilon = 0{,}01$.

□ Уточним корень, лежащий на отрезке $[2{,}5;\ 4]$. Результаты расчетов поместим в табл. 10.

Таблица 10

k	$f(a_k)$	a_k	b_k	$f(b_k)$	$c_k = \dfrac{a_k + b_k}{2}$	$f(c_k)$	$b_k - a_k$
0	-4,125	2,5	4	21	3,25	3,5156	1,5
1	-4,125	2,5	3,25	3,5156	2,875	-1,3769	0,75
2	-1,3769	2,875	3,25	3,5156	3,0625	0,78149	0,375
3	-1,3769	2,875	3,0625	0,7815	2,96875	-0,3672	0,1875
4	-0,3672	2,9687	3,0625	0,7815	3,01562	0,18945	0,09375
5	-0,3672	2,9687	3,0156	0,1894	2,99218	-0,0933	0,04687
6	-0,0933	2,9921	3,0156	0,1894	3,0039	0,0469	0,02344
7	-0,0933	2,9921	3,0039	0,0469	2,99804	-0,02349	0,01172
8	-0,02349	2,99804	3,0039	0,0469	3,00097	0,011647	0,00586

В результате найден интервал $[2{,}99804;\ 3{,}0039]$ и приближенное значение корня $x_* \cong 3{,}00097$.

Аналогично могут быть найдены интервалы, содержащие остальные корни уравнения.■

Занятие 12. МЕТОДЫ ПРИБЛИЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ И ИНТЕГРАЛЬНОЕ СГЛАЖИВАНИЕ

Часть I. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

А. ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МНОГОЧЛЕН ЛАГРАНЖА

Пусть на множестве $\Omega = [a, b]$ задана сетка $\Omega_n = \left\{x_i,\ i = \overline{0, n}\right\}$, определяемая $n+1$ точкой $x_0, x_1, ..., x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i),\ i = \overline{0, n}$:

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), ..., y_n = f(x_n),$$

где $x_i \in [a, b] = [x_0, x_n]$ - в общем случае неравноотстоящие узлы, определяемые шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \text{var}$), $i = \overline{0, n-1}$.

Требуется найти многочлен *n-й степени*, проходящий через все заданные точки.

Интерполяционный многочлен Лагранжа n-й степени имеет вид

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(x-x_0)\cdot(x-x_1)...(x-x_{i-1})\cdot(x-x_{i+1})...(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdot(x_i-x_1)...(x_i-x_{i-1})\cdot(x_i-x_{i+1})...(x_i-x_n)} f_i .$$

Многочлен $L_n(x)$ является многочленом степени n и удовлетворяет условиям интерполяции: $L_n(x_i) = f_i,\ i = \overline{0, n}$.

Для записи интерполяционного многочлена Лагранжа удобно пользоваться табл.1.

Таблица 1

$x - x_0$	$x_0 - x_1$	$x_0 - x_2$	...	$x_0 - x_n$	D_0	f_0
$x_1 - x_0$	$x - x_1$	$x_1 - x_2$	...	$x_1 - x_n$	D_1	f_1
$x_2 - x_0$	$x_2 - x_1$	$x - x_2$	...	$x_2 - x_n$	D_2	f_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_n - x_0$	$x_n - x_1$	$x_n - x_2$	...	$x - x_n$	D_n	f_n
$\Pi_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\cdot ... \cdot(x-x_n)$					D_i	f_i

Здесь D_i – произведение элементов i-й строки, $\Pi_{n+1}(x)$ – произведение элементов главной диагонали.

Тогда многочлен Лагранжа может быть записан в форме

$$L_n(x) = \Pi_{n+1}(x) \sum_{i=0}^{n} \frac{f_i}{D_i}.$$

Б. ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ НЬЮТОНА

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МНОГОЧЛЕН НЬЮТОНА ДЛЯ НЕРАВНОМЕРНОЙ СЕТКИ

Пусть исходная (интерполируемая) сеточная функция $y_i = f\left(x_i\right) = f_i, \quad i = \overline{0, n}$, задана на неравномерной сетке $\Omega_n \equiv \{x_0, x_1, x_2, ..., x_n\}$, характеризующейся шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = \text{var}$.

Выбрав внутри неравномерной сетки соответствующие шаблоны интерполяции $(x_i, x_{i+1}), (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}), ..., (x_i, x_{i+1}, .., x_{i+k})$, введем следующие определения *разделенных разностей*:

– *разделенная разность нулевого порядка*: $f(x_i) = f_i$;

– *разделенная разность первого порядка*: $f(x_i, x_{i+1}) = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$;

– *разделенная разность второго порядка*:
$f(x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = \dfrac{f(x_{i+1}, x_{i+2}) - f(x_i, x_{i+1})}{x_{i+2} - x_i}$;

– *разделенная разность k-го порядка*:

$$f(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k}) = \frac{f(x_{i+1}, x_{i+2}, ..., x_{i+k}) - f(x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k-1})}{x_{i+k} - x_i};$$

– *разделенная разность n-го порядка в узле* x_0:

$$f(x_0, x_1, ..., x_n) = \frac{f(x_1, x_2, ..., x_n) - f(x_0, x_1, ..., x_{n-1})}{x_n - x_0}.$$

Интерполяционный многочлен Ньютона n-й степени имеет вид

$$N_n(x) = f_0 + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + ... +$$

$$+ f(x_0, x_1, ..., x_n)(x - x_0)(x - x_1) \cdot ... \cdot (x - x_{n-1}).$$

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ НЬЮТОНА ДЛЯ РАВНОМЕРНОЙ СЕТКИ

Пусть исходная (интерполируемая) сеточная функция $y_i = f\left(x_i\right) = f_i, \quad i = \overline{0, n}$, задана на равномерной сетке $\Omega_n \equiv \{x_0, x_1, x_2, ..., x_n\}$, характеризующейся шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = h = \text{const}$.

Выбрав внутри равномерной сетки соответствующие шаблоны интерполяции $(x_i, x_{i+1}), (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}), ..., (x_i, x_{i+1}, .., x_{i+k})$, введем следующие определения *конечных разностей*:

– *конечная разность нулевого порядка*: f_i;

– *конечная разность первого порядка*: $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$;

– *конечная разность второго порядка*: $\Delta^2 f_i = \Delta(\Delta f_i) = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i$;

– *конечная разность k-го порядка*: $\Delta^k f_i = \Delta(\Delta^{k-1} f_i) = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j C_k^j f_{i+j}$,

где $C_k^j = \dfrac{k!}{(k-j)!\,j!}$;

– *конечная разность n-го порядка в узле x_0*: $\Delta^n f_0 = \Delta^{n-1} f_1 - \Delta^{n-1} f_0$.

Интерполяционный многочлен Ньютона n-го порядка имеет вид

$$N_n^{(I)}(q) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{1!} q + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} q(q-1) + \ldots + \frac{\Delta^n f_0}{n!} q(q-1)\ldots(q-n+1),$$

где $q = \dfrac{x - x_0}{h}$ - *фаза интерполяции относительно точки x_0*.

Пример 1. Требуется:

а) найти интерполяционный многочлен Лагранжа третьей степени для сеточной функции, заданной табл. 2. Вычислить значение функции в точке $x_* = 2{,}5$;

б) найти интерполяционный многочлен Ньютона третьей степени для сеточной функции, заданной табл. 2.

Таблица 2

i	0	1	2	3
x_i	2	3	4	5
$f(x_i) = f_i$	7	5	8	7

□ 1. Составим многочлен Лагранжа. Для этого заполним табл. 3, соответствующую табл. 1.

Таблица 3

$x-2$	–1	–2	–3	$-6\cdot(x-2)$	7
1	$x-3$	–1	–2	$2\cdot(x-3)$	5
2	1	$x-4$	–1	$-2\cdot(x-4)$	8
3	2	1	$x-5$	$6\cdot(x-5)$	7
$\Pi_4(x) = (x-2)(x-3)(x-4)(x-5)$				D_i	f_i

Получаем:

$$L_3(x) = \Pi_4(x)\sum_{i=0}^{3}\frac{f_i}{D_i} = \frac{(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)\cdot 7}{-6\cdot(x-2)} + \frac{(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)\cdot 5}{2\cdot(x-3)} +$$

$$+ \frac{(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)\cdot 8}{-2\cdot(x-4)} + \frac{(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)\cdot 7}{6\cdot(x-5)} =$$

$$= -\frac{7}{6}\cdot(x-3)(x-4)(x-5)+\frac{5}{2}\cdot(x-2)(x-4)(x-5)-4\cdot(x-2)(x-3)(x-5)+$$

$$+\frac{7}{6}\cdot(x-2)(x-3)(x-4) = -\frac{3}{2}x^3+16x^2-\frac{107}{2}x+62\,.$$

2. Вычислим значение функции в заданной точке: $L_3(2{,}5)=4{,}8125$. ■

Составим многочлен Ньютона, справедливый *для произвольного расположения узлов*. Для этого сформируем табл. 4.

Таблица 4

x_i	f_i	$f(x_j,x_{j+1})$	$f(x_j,x_{j+1},x_{j+2})$	$f(x_j,x_{j+1},x_{j+2},x_{j+3})$
2	7			
		-2		
3	5		$\frac{5}{2}$	
		3		$-\frac{3}{2}$
4	8		-2	
		-1		
5	7			

$$f(x_0,x_1)=\frac{5-7}{3-2}=-2\,;\qquad f(x_1,x_2)=\frac{8-5}{4-3}=3\,;\qquad f(x_2,x_3)=\frac{7-8}{5-4}=-1\,;$$

$$f(x_0,x_1,x_2)=\frac{3-(-2)}{4-2}=\frac{5}{2}\,;\;\; f(x_1,x_2,x_3)=\frac{-1-3}{5-3}=-2\,;$$

$$f(x_0,x_1,x_2,x_3)=\frac{-2-\frac{5}{2}}{5-2}=-\frac{3}{2}\,.$$

Для $n=3$ имеем

$$N_3(x)=f(x_0)+(x-x_0)\,f(x_0,x_1)+(x-x_0)(x-x_1)\,f(x_0,x_1,x_2)+$$

$$+(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\,f(x_0,x_1,x_2,x_3)=7+(x-2)\cdot(-2)+(x-2)\cdot(x-3)\cdot\frac{5}{2}+$$

$$+(x-2)\cdot(x-3)\cdot(x-4)\cdot(-\frac{3}{2})=-\frac{3}{2}x^3+16x^2-\frac{107}{2}x+62\,.$$

Поскольку в данной задаче заданы *равностоящие узлы*, воспользуемся также формулой для первого интерполяционного многочлена Ньютона:

$$N_3^{(I)}(q)=f(x_0)+\frac{\Delta f_0}{1!}q+\frac{\Delta^2 f_0}{2!}q\cdot(q-1)+\frac{\Delta^3 f_0}{3!}q\cdot(q-1)\cdot(q-2)\,,$$

где $q=\dfrac{x-x_0}{h}=\dfrac{x-2}{1}=x-2\,.$

Составим табл. 5.

Таблица 5

x_i	$f_i = f(x_i)$	Δf_j	$\Delta^2 f_j$	$\Delta^3 f_j$
2	7			
		-2		
3	5		5	
		3		-9
4	8		-4	
		-1		
5	7			

Имеем: $\Delta f_0 = 5 - 7 = -2$; $\Delta f_1 = 8 - 5 = 3$; $\Delta f_2 = 7 - 8 = -1$; $\Delta^2 f_0 = 3 - (-2) = 5$;

$\Delta^2 f_1 = -1 - 3 = -4$; $\Delta^3 f_0 = -4 - 5 = -9$. Поэтому

$$N_3^{(I)}(x) = 7 + \frac{(-2)}{1!}q + \frac{5}{2!}q\cdot(q-1) + \frac{(-9)}{3!}q\cdot(q-1)\cdot(q-2) = -\frac{3}{2}q^3 + 7q^2 - \frac{15}{2}q + 7\Bigg|_{q=\frac{x-2}{1}} =$$

$$= -\frac{3}{2}\cdot(x^3 - 6x^2 + 12x - 8) + 7\cdot(x^2 - 4x + 4) - \frac{15}{2}\cdot(x-2) + 7 = -\frac{3}{2}x^3 + 16x^2 - \frac{107}{2}x + 62.$$

Часть II. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИНТЕГРАЛЬНОГО СГЛАЖИВАНИЯ

ТОЧЕЧНЫЙ МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Методика решения задачи сглаживания

Шаг 1. Записать систему:

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 + \ldots + s_m a_m &= t_0, \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 + \ldots + s_{m+1} a_m &= t_1, \\ &\vdots \\ s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \ldots + s_{2m} a_m &= t_m. \end{aligned} \qquad (*)$$

где

$$s_0 = n + 1, \quad t_0 = f_0 + f_1 + \ldots + f_n,$$

$$s_k = x_0^k + x_1^k + \ldots + x_n^k, \ k = 1,\ldots,2m;$$

$$t_k = x_0^k f_0 + x_1^k f_1 + \ldots + x_n^k f_n, \ k = 1,\ldots,m.$$

Шаг 2. Решить полученную систему одним из методов решения СЛАУ и найти коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Шаг 3. Записать искомую сглаживающую функцию

$$f_m(x,\overline{a}) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m.$$

Пример 2. Решить задачу аппроксимации сеточной функции, заданной табл. 6, при $m = 1$ и $m = 2$.

Таблица 6

i	0	1	2	3
x_i	2	3	4	5
$f(x_i) = f_i$	7	5	8	7

□ Пусть степень многочлена $m = 1$, тогда решение ищется в виде

$$f_1(x,\overline{a}) = a_0 + a_1 x .$$

1. Для составления системы (*):

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 = t_0 ,$$
$$s_1 a_0 + s_2 a_1 = t_1$$

найдем ее коэффициенты s_0, s_1, s_2. Расчеты поместим в табл. 7, где в последней числовой строке находятся коэффициенты системы.

Таблица 7

x_i	f_i	1	x_i^2	$x_i f_i$
2	7	1	4	14
3	5	1	9	15
4	8	1	16	32
5	7	1	25	35
14	27	4	54	96
s_1	t_0	s_0	s_2	t_1

В результате получаем

$$4a_0 + 14a_1 = 27 ,$$
$$14a_0 + 54a_1 = 96 .$$

2. Решение системы: $a_0 = 5{,}7$; $a_1 = 0{,}3$.

3. Искомая сглаживающая функция имеет вид $f_1(x,\overline{a}) = 5{,}7 + 0{,}3x$, а среднеквадратичная погрешность $\delta_1(\overline{a}) = 1{,}0368$.

Пусть $m = 2$, тогда решение ищется в виде

$$f_2(x,\overline{a}) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 .$$

1. Составим систему (*):

$$s_0 a_0 + s_1 a_1 + s_2 a_2 = t_0 ,$$
$$s_1 a_0 + s_2 a_1 + s_3 a_2 = t_1 ,$$
$$s_2 a_0 + s_3 a_1 + s_4 a_2 = t_2 .$$

Расчеты коэффициентов системы приведены в табл. 8.

Таблица 8

x_i	f_i	1	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i f_i$	$x_i^2 f_i$
2	7	1	4	8	16	14	28
3	5	1	9	27	81	15	45
4	8	1	16	64	256	32	128
5	7	1	25	125	625	35	175
14	27	4	54	224	978	96	376
s_1	t_0	s_0	s_2	s_3	s_4	t_1	t_2

В результате получаем систему

$$
\begin{aligned}
&4a_0 + 14a_1 + 54a_2 = 27, \\
&14a_0 + 54a_1 + 224a_2 = 96, \\
&54a_0 + 224a_1 + 978a_2 = 376.
\end{aligned}
$$

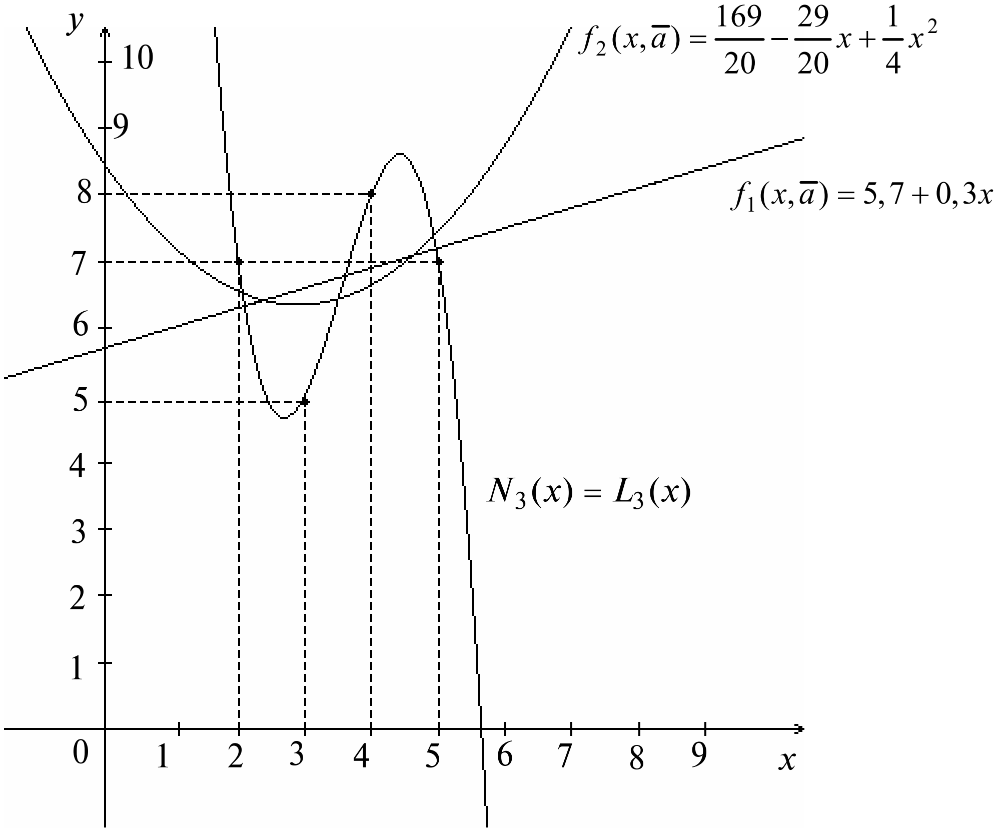


Рис. 1

2. Решаем полученную систему методом Гаусса.

Прямой ход:

$$\begin{pmatrix} \boxed{4} & 14 & 54 & 27 \\ 14 & 54 & 224 & 96 \\ 54 & 224 & 978 & 376 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & \frac{7}{2} & \frac{27}{2} & \frac{27}{4} \\ 0 & \boxed{5} & 35 & 1{,}5 \\ 0 & 35 & 249 & 11{,}5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & \frac{7}{2} & \frac{27}{2} & \frac{27}{4} \\ 0 & 1 & 7 & 0{,}3 \\ 0 & 0 & \boxed{4} & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & \frac{7}{2} & \frac{27}{2} & \frac{27}{4} \\ 0 & 1 & 7 & 0{,}3 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Обратный ход:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{7}{2} & \frac{27}{2} \\ 0 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{27}{4} \\ 0{,}3 \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{aligned} a_0 + \tfrac{7}{2}a_1 + \tfrac{27}{2}a_2 &= \tfrac{27}{4}, \\ a_1 + 7a_2 &= 0{,}3, \\ a_2 &= \tfrac{1}{4}. \end{aligned}$$

Отсюда $\quad a_2 = \dfrac{1}{4}, \quad a_1 = \dfrac{3}{10} - 7 \cdot \dfrac{1}{4} = -\dfrac{29}{20},$

$$a_0 = \frac{27}{4} - \frac{27}{4}a_2 - \frac{7}{2}a_1 = \frac{27}{4} - \frac{27}{4} \cdot \frac{1}{4} - \frac{7}{2} \cdot \left(-\frac{29}{20}\right) = \frac{169}{20}.$$

3. Искомая сглаживающая функция $f_2(x, \overline{a}) = \dfrac{169}{20} - \dfrac{29}{20}x + \dfrac{1}{4}x^2$, а среднеквадратичная погрешность $\delta_2(\overline{a}) = 1{,}0062$.

На рис. 1 изображены заданная сеточная функция, сглаживающие многочлены при $m = 1$ и $m = 2$, а также интерполяционный многочлен (при этом $m = 3$).

Заметим, что если степень многочлена $m = 0$, то решение ищется в виде

$$f_0(x, \overline{a}) = a_0.$$

Для составления уравнения $s_0 a_0 = t_0$, следующего из (*), используем коэффициенты s_0, t_0 (табл. 8). В результате получим $4a_0 = 27$, или $a_0 = \dfrac{27}{4} = 6{,}75$. Искомая сглаживающая функция имеет вид $f_0(x, \overline{a}) = 6{,}75$, а среднеквадратическая погрешность $\delta_0(\overline{a}) = 1{,}0897$. При увеличении числа m среднеквадратичная погрешность уменьшается: $\delta_0(\overline{a}) > \delta_1(\overline{a}) > \delta_2(\overline{a})$. При $m = 3$ среднеквадратичная погрешность $\delta_3(\overline{a})$ равна нулю, так как многочлен проходит через все заданные точки. ■

Занятие 13. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Пример 1. Приближенно решить задачу Коши

$$y' = -2y - 3x + 2, \quad y(0) = 0$$

на отрезке $[0;1]$ с шагом $h = 0{,}1$ различными методами: Эйлера (явным и неявным), предсказания и коррекции второго порядка, Рунге–Кутты четвертого порядка и методом трапеций.

□ Поскольку явный метод Эйлера и метод Рунге–Кутты четвертого порядка относятся к классу ограниченно устойчивых, то для них требуется определить величины критического шага. Сравнивая данное уравнение с тестовым примером, заметим, что $\mu = -2$. Тогда для явного метода Эйлера $h_{кр} = -\frac{2}{\mu} = 1$, а для метода Рунге–Кутты $h_{кр} = -\frac{2{,}78}{\mu} = 1{,}39$. Следовательно, интегрирование с шагом $h = 0{,}1 < h_{кр}$ обеспечивает устойчивость этих методов.

Явный метод Эйлера. Из общей формулы

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_i, \hat{y}_i), \quad i = \overline{0, n-1}, \quad \hat{y}_0 = y_0;$$

получаем расчетную формулу явного метода Эйлера:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + 0{,}1 \cdot (-2\hat{y}_i - 3x_i + 2), \quad \hat{y}_0 = 0, \quad i = \overline{0{,}9};$$

Метод предсказания и коррекции второго порядка.

Шаг «предиктор»:

$$\hat{y}_{i+1}^{(\text{П})} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_i, \hat{y}_i) \ ,$$

Шаг «корректор»:

$$\hat{y}_{i+1} \equiv \hat{y}_{i+1}^{(\text{К})} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}[f(x_i, \hat{y}_i) + f(x_i + h_{i+1}, \hat{y}_{i+1}^{(\text{П})})] \ .$$

Отсюда следуют расчетные формулы метода предсказания и коррекции:

$$\hat{y}_{i+1}^{(\text{П})} = \hat{y}_i + 0{,}1 \cdot (-2\hat{y}_i - 3x_i + 2), \quad \hat{y}_0 = 0, \quad i = \overline{0{,}9};$$

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{0{,}1}{2}(-2\hat{y}_i - 3x_i + 2 - 2\hat{y}_{i+1}^{(\text{П})} - 3x_{i+1} + 2); \quad \hat{y}_0 = 0, \quad i = \overline{0{,}9};$$

Метод Рунге–Кутты. Из общей формулы

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{6}\left(K_{1,i} + 2K_{2,i} + 2K_{3,i} + K_{4,i}\right), \quad \hat{y}_0 = y_0, \quad i = \overline{0, n-1},$$

где $K_{1,i} = f_i = f(x_i, \hat{y}_i)$, $K_{2,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} K_{1,i}\right)$,

$$K_{3,i} = f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} K_{2,i}\right), \quad K_{4,i} = f\left(x_i + h_{i+1}, \hat{y}_i + h_{i+1} \cdot K_{3,i}\right),$$

следуют формулы метода Рунге–Кутты четвертого порядка:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{0{,}1}{6}(K_{1,i} + 2K_{2,i} + 2K_{3,i} + K_{4,i}),$$

$$K_{1,i} = -2\hat{y}_i - 3x_i + 2, \quad K_{2,i} = -2 \cdot (\hat{y}_i + 0{,}05 \cdot K_{1,i}) - 3 \cdot (x_i + 0{,}05) + 2;$$

$$K_{3,i} = -2 \cdot (\hat{y}_i + 0{,}05 \cdot K_{2,i}) - 3 \cdot (x_i + 0{,}05) + 2; \quad K_{4,i} = -2 \cdot (x_i + 0{,}1 \cdot K_{3,i}) - 3 \cdot (x_i + 0{,}1) + 2;$$

Неявный метод Эйлера. Из общей формулы

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \quad i = \overline{0, n-1}.$$

получаем расчетную формулу неявного метода Эйлера:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + 0{,}1 \cdot (-2\hat{y}_{i+1} - 3x_{i+1} + 2),$$

откуда

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{\hat{y}_i - 0{,}3x_{i+1} + 0{,}2}{1{,}2};$$

Метод трапеций. Из общей формулы

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}\left[f_i + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})\right] \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \quad i = \overline{0, n-1},$$

получаем расчетную формулу метода трапеций:

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{0{,}1}{2} \cdot (-2\hat{y}_i - 3x_i + 2 - 2\hat{y}_{i+1} - 3x_{i+1} + 2),$$

откуда

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{0{,}9 \cdot \hat{y}_i - \frac{3}{2} \cdot 0{,}1 \cdot x_i + 2 \cdot 0{,}1 - \frac{3}{2} \cdot 0{,}1 \cdot x_{i+1}}{1{,}1}.$$

Очевидно, в данном примере удалось получить явные формулы для нахождения $\hat{y}_{i+1}$ неявным методом Эйлера и методом трапеций лишь в силу линейности решаемого уравнения. В общем случае применяются методы простых итераций или Ньютона.

Точное решение рассматриваемой задачи Коши: $y(x) = 1{,}75 - 1{,}5x - 1{,}75\, e^{-2x}$. Результаты расчетов приведены в табл. 1, в последней строке которой указаны фактические погрешности.

Анализ результатов показывает, что при решении данной задачи метод предсказания и коррекции точнее явного и неявного методов Эйлера, но уступает методу Рунге–Кутты и совсем немного методу трапеций (порядок погрешности одинаков).■

Таблица 1

x_i	Явный метод Эйлера	Неявный метод Эйлера	Метод Рунге–Кутты	Метод предсказания и коррекции	Метод трапеций	$y(x)$
0,0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,1	0,200	0,142	0,167	0,165	0,168	0,167
0,2	0,330	0,238	0,277	0,273	0,279	0,277
0,3	0,404	0,287	0,340	0,335	0,342	0,340
0,4	0,433	0,306	0,364	0,359	0,366	0,364
0,5	0,427	0,297	0,356	0,351	0,358	0,356
0,6	0,391	0,264	0,323	0,318	0,325	0,323
0,7	0,333	0,212	0,268	0,264	0,270	0,268
0,8	0,256	0,143	0,197	0,192	0,199	0,197
0,9	0,165	0,061	0,111	0,107	0,112	0,111
1,0	0,062	-0,033	0,013	0,009	0,015	0,013
$\max \varepsilon_i$	0,068	0,059	0,0000104	0,005	0,002	

Пример 2. Найти приближенное решение задачи Коши

$$y' = z - 1, \quad y(0) = 1,$$

$$z' = -y - 2z, \quad z(0) = -1$$

на отрезке $[0;1]$ с шагом $h = 0{,}1$ методами Эйлера (неявным и модифицированным), Адамса–Бэшфорта третьего порядка и трапеций.

□ Путем прямой подстановки в систему легко убедиться в том, что точное решение задачи имеет вид $y(x) = -2 + 3e^{-x} + xe^{-x}$; $z(x) = 1 - 2e^{-x} - xe^{-x}$.

Выписываем формулы для нахождения приближенного решения указанными методами (при этом применяется векторная форма записи).

Для неявного метода Эйлера

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \quad i = \overline{0, n-1}.$$

имеем

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_{i+1} \\ \hat{z}_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_i \\ z_i \end{pmatrix} + 0{,}1 \cdot \begin{pmatrix} \hat{z}_{i+1} - 1 \\ -\hat{y}_{i+1} - 2\hat{z}_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_i + 0{,}1 \cdot \hat{z}_{i+1} - 0{,}1 \\ \hat{z}_i - 0{,}1 \cdot \hat{y}_{i+1} - 0{,}2 \cdot \hat{z}_{i+1} \end{pmatrix}, \qquad \begin{matrix} \hat{y}_0 = y(0) = 1, \\ \hat{z}_0 = z(0) = -1. \end{matrix}$$

Разрешая эту систему относительно $\hat{y}_{i+1}, \hat{z}_{i+1}$, окончательно получаем

$$\hat{y}_{i+1} = \frac{0{,}1 \cdot (\hat{z}_i - 0{,}1 \cdot \hat{y}_i + 0{,}001)}{1{,}21} - 0{,}1; \qquad \hat{z}_{i+1} = \frac{\hat{z}_i - 0{,}1 \cdot \hat{y}_i + 0{,}01}{1{,}21}.$$

Соотношения

$$\hat{y}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2} f(x_i, \hat{y}_i), \quad i = \overline{0, n-1},$$

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + h_{i+1} f\left(x_i + \frac{h_{i+1}}{2}, \hat{y}_{i+\frac{1}{2}} \right), \quad i = \overline{0, n-1}.$$

для модифицированного метода Эйлера принимают вид

$$\hat{y}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{y}_i + \frac{0{,}1}{2}(\hat{z}_i - 1); \quad \hat{z}_{i+\frac{1}{2}} = z_i + \frac{0{,}1}{2}(-\hat{y}_i - 2\hat{z}_i);$$

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + 0{,}1 \cdot \left(\hat{z}_{i+\frac{1}{2}} - 1 \right); \quad \hat{z}_{i+1} = \hat{z}_i + 0{,}1 \cdot \left(-\hat{y}_{i+\frac{1}{2}} - 2\hat{z}_{i+\frac{1}{2}} \right).$$

Для метода Адамса–Бэшфорта третьего порядка из

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h}{12}[23 f_i - 16 f_{i-1} + 5 f_{i-2}], \quad i = \overline{2, n-1};$$

находим

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{0{,}1}{12}[23 \cdot (\hat{z}_i - 1) - 16 \cdot (\hat{z}_{i-1} - 1) + 5 \cdot (\hat{z}_{i-2} - 1)],$$

$$\hat{z}_{i+1} = \hat{z}_i + \frac{0{,}1}{12}[23 \cdot (-\hat{y}_i - 2\hat{z}_i) - 16 \cdot (-\hat{y}_{i-1} - 2\hat{z}_{i-1}) + 5 \cdot (-\hat{y}_{i-2} - 2\hat{z}_{i-2})].$$

Для определения «разгонных» точек $(x_0, \hat{y}_0, \hat{z}_0), (x_1, \hat{y}_1, \hat{z}_1), (x_2, \hat{y}_2, \hat{z}_2)$ воспользуемся модифицированным методом Эйлера. Точка $(x_0, \hat{y}_0, \hat{z}_0)$ определяется начальными условиями $(0; 1; -1)$.

Выпишем соотношения для метода трапеций

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + \frac{h_{i+1}}{2}\left[f_i + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}) \right] \equiv \Phi(x_i, x_{i+1}, \hat{y}_{i+1}), \ i = \overline{0, n-1},$$

и разрешим их относительно неизвестных:

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_{i+1} \\ \hat{z}_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_i \\ \hat{z}_i \end{pmatrix} + \frac{0{,}1}{2}\left[\begin{pmatrix} \hat{z}_i - 1 \\ -\hat{y}_i - 2\hat{z}_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{z}_{i+1} - 1 \\ -\hat{y}_{i+1} - 2\hat{z}_{i+1} \end{pmatrix} \right] =$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{y}_i + 0{,}05\hat{z}_i + 0{,}05\hat{z}_{i+1} - 0{,}1 \\ -0{,}05\hat{y}_i - 0{,}05\hat{y}_{i+1} + 0{,}9\hat{z}_i - 0{,}1\hat{z}_{i+1} \end{pmatrix},$$

откуда путем разрешения системы относительно $\hat{y}_{i+1}, \hat{z}_{i+1}$ получаем

$$\hat{y}_{i+1} = \hat{y}_i + 0{,}05\hat{z}_i + 0{,}05\frac{-0{,}1\hat{y}_i + 0{,}8975\hat{z}_i + 0{,}05}{1{,}1025} - 0{,}1;$$

$$\hat{z}_{i+1} = \frac{-0{,}1\hat{y}_i + 0{,}8975\hat{z}_i + 0{,}05}{1{,}1025}.$$

Результаты проведенных расчетов даны в табл. 2 для $\hat{y}_i, y(x)$ и табл. 3 для $\hat{z}_i, z(x)$ соответственно. Из их анализа вытекает, что наиболее точно величину $\hat{y}_i$ можно рассчитать методом Адамса–Бэшфорта, а величину $\hat{z}_i$ – методом трапеций. ■

Таблица 2

x_i	Неявный метод Эйлера	Модиф. метод Эйлера	Метод Адамса–Бэшфорта	Метод трапеций	Точное решение
0,0	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
0,1	0,80992	0,80500	0,80499	0,80499	0,80500
0,2	0,62960	0,61997	0,61991	0,61991	0,61994
0,3	0,45885	0,44479	0,44469	0,44464	0,44470
0,4	0,29740	0,27924	0,27908	0,279000	0,27909
0,5	0,14500	0,12309	0,12285	0,12273	0,12286
0,6	0,00131	-0,02397	-0,02428	-0,02444	-0,02428
0,7	-0,13397	-0,16224	-0,16265	-0,16284	-0,16263
0,8	-0,26119	-0,29208	-0,29257	-0,29279	-0,29255
0,9	-0,38072	-0,41384	-0,41441	-0,41465	-0,41438
1,0	-0,49287	-0,52787	-0,52853	-0,52879	-0,52848
$\max \varepsilon_i$	0,03720415	0,00067291	0,00005942	0,00033550	-

Таблица 3

x_i	Неявный метод Эйлера	Модиф. метод Эйлера	Метод Адамса–Бэшфорта	Метод трапеций	Точное решение
0,0	-1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000	-1,00000
0,1	-0,90083	-0,90000	-0,90023	-0,90023	-0,90016
0,2	-0,80316	-0,80095	-0,80132	-0,80132	-0,80121
0,3	-0,70753	-0,70357	-0,70402	-0,70401	-0,70388
0,4	-0,61440	-0,60844	-0,60893	-0,60890	-0,60877
0,5	-0,52408	-0,51601	-0,51650	-0,51645	-0,51632
0,6	-0,43684	-0,42663	-0,42709	-0,42702	-0,42691
0,7	-0,35287	-0,34054	-0,34095	-0,34087	-0,34078
0,8	-0,27229	-0,25794	-0,25828	-0,25818	-0,25812
0,9	-0,19518	-0,17894	-0,17920	-0,17908	-017905
1,0	-0,12158	-0,10357	-0,10378	-0,10364	-0,10364
$\max \varepsilon_i$	0,01958133	0,00032586	0,00012145	0,00003005	-

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Необходимые и достаточные условия безусловного экстремума.
2. Схема исследования функций на безусловный экстремум.
3. Необходимые и достаточные условия условного экстремума. Ограничения типа равенств.
4. Необходимые и достаточные условия условного экстремума. Ограничения типа неравенств.
5. Необходимые и достаточные условия условного экстремума. Смешанные ограничения.
6. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы первого порядка. Метод градиентного спуска с постоянным шагом.
7. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы первого порядка. Метод наискорейшего градиентного спуска.
8. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы первого порядка. Метод покоординатного спуска.
9. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы первого порядка. Метод Гаусса–Зейделя.
10. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы первого порядка. Метод сопряженных градиентов.
11. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы второго порядка. Метод Ньютона.
12. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы второго порядка. Метод Ньютона и его модификации: метод Ньютона–Рафсона, упрощенный метод Ньютона, метод Ньютона–Марквардта.
13. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы одномерной минимизации. Методы нулевого порядка. Метод дихотомии.
14. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы нулевого порядка. Методы одномерной минимизации. Метод золотого сечения.
15. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы нулевого порядка. Методы одномерной минимизации. Метод квадратичной интерполяции-экстраполяции.
16. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы нулевого порядка. Метод конфигураций.
17. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы нулевого порядка. Метод деформируемого многогранника.
18. Численные методы поиска безусловного экстремума. Методы нулевого порядка. Методы случайного поиска.

19. Численные методы поиска условного экстремума. Метод штрафов.
20. Численные методы поиска условного экстремума. Метод барьерных функций.
21. Задача линейного программирования. Графическое решение.
22. Задача линейного программирования. Симплекс-метод. Ограничения типа равенств.
23. Задача линейного программирования. Симплекс-метод. Ограничения типа неравенств.
24. Задача линейного целочисленного программирования. Метод ветвей и границ.
25. Транспортная задача. Метод потенциалов.
26. Численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Метод простой итерации.
27. Численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений. Метод Зейделя.
28. Численные методы решения нелинейных уравнений. Метод простой итерации.
29. Численные методы решения нелинейных уравнений. Метод Ньютона.
30. Численные методы решения нелинейных уравнений. Методы половинного деления и метод хорд.
31. Численные методы решения нелинейных уравнений. Модификации метода Ньютона: упрощенный метод Ньютона, метод Ньютона–Бройдена, метод секущих.
32. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод простой итерации.
33. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод Зейделя.
34. Численные методы решения систем нелинейных уравнений. Метод Ньютона и его модификации.
35. Задача интерполяции. Применение многочлена Лагранжа.
36. Задача интерполяции. Применение многочленов Ньютона.
37. Задача интерполяции. Применение сплайнов.
38. Задача аппроксимации. Точечный метод наименьших квадратов.
39. Задача аппроксимации. Интегральный метод наименьших квадратов.
40. Методы численного дифференцирования.
41. Методы численного интегрирования.
42. Численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Явные методы. Явный метод Эйлера, метод предсказания и коррекции, метод Эйлера–Коши.
43. Численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Явные методы. Метод Рунге–Кутты. Метод Адамса–Башфорта.
44. Численные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Неявные методы. Неявный метод Эйлера, метод трапеций, метод Адамса-Мултона.

ТИПОВОЕ ЗАДАНИЕ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. Решить задачу поиска безусловного экстремума функции:

$$f(X) = x^2 + 2x \cdot y + 3y^2 + 20x + 10y + 2 \to \text{extr}\ .$$

Задание:

а) аналитически отыскать экстремум функции двух переменных (с использованием необходимых и достаточных условий безусловного экстремума);

б) сделать три итерации методом градиентного спуска из начальной точки $X^0 = (-1, -2)^T$ *в направлении экстремума;*

в) сделать две итерации методом наискорейшего градиентного спуска из начальной точки $X^0 = (-1, -2)^T$ *в направлении экстремума;*

г) сделать две итерации методом Гаусса−Зейделя из начальной точки $X^0 = (-1, -2)^T$ *в направлении экстремума;*

д) сделать две итерации методом сопряженных градиентов из начальной точки $X^0 = (-1, -2)^T$ *в направлении экстремума;*

е) сделать одну итерацию методом Ньютона из начальной точки $X^0 = (-1, -2)^T$ *в направлении экстремума.*

2. Решить задачу поиска условного экстремума при ограничении типа равенств:

$$f(X) = x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1 - 6x_2 - 12 \to \text{extr}$$

$$\text{при ограничении}\ \ 2x_1 + x_2 = -1\ .$$

Задание: *найти решение задачи:*

а) графически;

б) использованием необходимых и достаточных условий условного экстремума;

в) методом штрафных функций.

3. Решить задачу линейного программирования:

$$\begin{aligned} f(X) &= 4x_1 + x_2 \to \text{extr} \\ -x_1 + x_2 &\le 1, \\ 2x_1 + x_2 &\ge 4, \\ x_1, x_2 &\ge 0\ . \end{aligned}$$

Задание: *найти решение задачи:*

а) графически;

б) симплекс-методом.

4. Дана транспортная задача, заданная матрицей перевозок:

Пункты	B_1	B_2	B_3	Запасы
A_1	2	3	4	**20**
A_2	1	2	5	**40**
Потребности	**10**	**20**	**30**	**60**

<u>Задание:</u>

а) найти начальный план перевозок;

б) найти решение задачи методом потенциалов.

5. Решить систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 + x_4 &= 2,\\ x_1 - 2x_2 - 5x_3 + x_4 &= -5,\\ 5x_1 - 3x_2 + x_3 - 4x_4 &= -1,\\ 10x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 &= 13. \end{aligned}$$

<u>Задание:</u> *найти решение системы*:

а) методом простых итераций (*точность счета* $\varepsilon = 0{,}01$);

б) методом Зейделя (*точность счета* $\varepsilon = 0{,}01$).

6. Решить нелинейное алгебраическое уравнение:

$$x^3 - 11x^2 + 36x - 36 = 0\,.$$

<u>Задание:</u>

а) отделить корни алгебраического уравнения;

б) уточнить наименьший (*левый*) *корень уравнения методом Ньютона на отрезке* $[a,\ b]$ (*точность счета* $\varepsilon = 0{,}01$);

в) уточнить наименьший (*левый*) *корень уравнения методом простых итераций на отрезке* $[a,\ b]$ (*точность счета* $\varepsilon = 0{,}01$);

г) уточнить наименьший (*левый*) *корень уравнения методом половинного деления на отрезке* $[a,\ b]$ (*точность счета* $\varepsilon = 0{,}03$).

7. Дана сеточная функция, определенная таблицей:

x	1	2	3	4
$y = f(x)$	1	10	2	1

<u>Задание:</u>

а) построить интерполяционный многочлен Лагранжа;

б) построить интерполяционный многочлен Ньютона;

в) аппроксимировать функцию многочленами 1-го и 2-го порядков методом наименьших квадратов.

8. Дана сеточная функция, определенная таблицей:

x	1	2	3	4
$y=f(x)$	1	10	2	1

<u>Задание:</u>

а) найти производные первого порядка, используя все двухточечные шаблоны во внутренних точках интервала $[x_0,\ x_3]$;

б) найти производные первого порядка, используя все трехточечные шаблоны во внутренних точках интервала $[x_0,\ x_3]$;

в) найти производные второго порядка, используя все трехточечные шаблоны во внутренних точках интервала $[x_0,\ x_3]$;

г) вычислить интеграл $\int\limits_{x_0}^{x_3} f(x)dx$*, используя формулу прямоугольников*;

д) вычислить интеграл $\int\limits_{x_0}^{x_3} f(x)dx$*, используя модифицированную формулу прямоугольников*;

е) вычислить интеграл $\int\limits_{x_0}^{x_3} f(x)dx$*, используя формулу трапеций.*

9. Дана задача Коши для дифференциального уравнения 1-го порядка:

$$y' + y\cdot \operatorname{tg} x = \cos x, \qquad y(0)=2.$$

<u>Задание:</u> *найти решение задачи Коши*:

а) аналитически;

б) явным методом Эйлера на отрезке $[0,1]$. *Число разбиений отрезка выбрать* $N=2, 4, 5$. *Построить графики аналитического и численного решений на одном чертеже*;

в) методом предсказания и коррекции на отрезке $[0,1]$. *Число разбиений отрезка выбрать* $N=2, 4, 5$. *Построить графики аналитического и численного решений на одном чертеже*;

г) неявным методом Эйлера на отрезке $[0,1]$. *Число разбиений отрезка выбрать* $N=2, 4, 5$. *Построить графики аналитического и численного решений на одном чертеже*;

д) методом трапеций на отрезке $[0,1]$. *Число разбиений отрезка выбрать* $N=2, 4, 5$. *Построить графики аналитического и численного решений на одном чертеже.*

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ВЫПОЛНЕНИЮ ТИПОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенной таблице указаны ссылки на теорию и алгоритмы решения задач, содержащихся в типовом задании. Рекомендуется сначала изучить материал лекции, обращая внимание на основные определения, постановки задач, принципы формирования численных методов. Далее необходимо проработать материал практического занятия, изучив алгоритм и пошаговое решение типового примера.

Номера лекций и занятий	Номер задания, тема
Лекция 1,5 Занятия 1,3,4	1. Необходимые и достаточные условия безусловного экстремума. Численные методы первого и второго порядка
Лекции 2,6 Занятия 2,5	2 Необходимые и достаточные условия условного экстремума. Ограничения типа равенств. Численные методы поиска условного экстремума
Лекция 7 Занятия 6,7	3. Задача линейного программирования
Лекция 8 Занятие 9	4. Транспортная задача
Лекция 9 Занятие 10	5. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений
Лекция 11 Занятие 11	6. Итерационные методы решения нелинейных уравнений
Лекции 13, 14 Занятие 12	7. Методы интерполяции и аппроксимации сеточных функций
Лекция 15	8. Методы численного дифференцирования и интегрирования сеточных функций
Лекции 16, 17 Занятие 13	9. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. *Пантелеев А.В., Летова Т.А.* Методы оптимизации в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 2008.

2. *Пантелеев А.В., Летова Т.А.* Методы оптимизации: практический курс: учебное пособие с мультимедиа сопровождением. – М.: Логос, 2011 (Новая университетская библиотека).

3. *Киреев В.И., Пантелеев А.В.* Численные методы в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 2008.

4. *Лунева С.Ю.* Методические указания к выполнению расчетно-графической работы по теории оптимизации и численным методам / Под ред. проф. Пантелеева А.В. − М.: Доброе слово, 2011.

Дополнительная

5. *Акулич И.Л.* Математическое программирование в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 1986.

6. *Базара М., Шетти К.* Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. – М.: Мир, 1982.

7. *Летова Т.А., Пантелеев А.В.* Экстремум функций в примерах и задачах.- М.: Изд-во МАИ, 1998.

8. *Пантелеев А.В.* Вариационное исчисление в примерах и задачах.- М.: Высшая школа, 2006.

9. *Пантелеев А.В., Руденко Е.А., Бортаковский А.С.* Нелинейные системы управления: описание, анализ и синтез.- М.: Вузовская книга, 2008.

10. *Поляк Б.Т.* Введение в оптимизацию. – М.: Наука, 1983.

11. *Ракитин В.И.* Руководство по методам вычислений и приложения MATHCAD.- М.: Физматлит, 2005.

12. *Семенов В.В., Пантелеев А.В., Бортаковский А.С.* Математическая теория управления в примерах и задачах.- М.: Изд-во МАИ, 1997.

13. *Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л.* Численные методы. – М.: Физматлит, 2006.

14. *Химмельблау Д.* Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975.