Оптимизация функций одной переменной

Полиномиальная аппроксимация

- Основная идея методов полиномиальной аппроксимации связана с возможностью аппроксимации гладкой функции полиномом и последующего использования аппроксимирующего полинома для оценивания координаты точки оптимума. Необходимыми условиями эффективной реализации такого подхода являются унимодальность и непрерывность исследуемой функции.
- Согласно теореме Вейерштрасса об аппроксимации, непрерывную функцию в некотором интервале можно аппроксимировать полиномом достаточно высокого порядка. Следовательно, если функция унимодальна и найден полином, который достаточно точно ее аппроксимирует, то координаты точки оптимума функции можно оценить путем вычисления координаты точки оптимума полинома.
- Простейшим вариантом полиномиальной аппроксимации является квадратичная аппроксимация, которая основана на том факте, что функция, принимающая минимальное значение во внутренней точке интервала, должна быть, по крайней мере, квадратичной. Если же функция линейная, то ее оптимальное значение может достигаться только в одной из двух граничных точек интервала. Таким образом, при реализации метода оценивания с использованием квадратичной аппроксимации предполагается, что в ограниченном интервале можно аппроксимировать функцию квадратичным полиномом, а затем использовать построенный полином для оценивания

Полиномиальная аппроксимация

- Пусть известны значения функции f(x) в трех разных точках x1, x2, x3, равные соответственно f(x1), f(x2), f(x3) тогда функция f(x) может быть аппроксимирована квадратичной функцией : $q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$, где коэффициенты a_0, a_1, a_2 определяются из условия, что значения функции в этих точках равны значениям полинома q(x) в этих же точках.
- Имеем $f(x_1) = q(x_1) = a_0, f(x_2) = q(x_2) = f(x_1) + a_1(x_2 - x_1)$
- Отсюда получаем $a_1 = \big(f(x_2) - f(x_1)\big)/(x_2 - x_1)$
- Аналогично получаем $a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2}(\frac{f(x_3) - f(x_1)}{x_3 - x_1} - \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2})$
- Квадратичная функция q(x) достигает минимума в точке x*=$\frac{x_2 + x_1}{2} - \frac{a_1}{2a_2}$.
- Поскольку функция f(x) на рассматриваемом интервале обладает свойством унимодальности, а аппроксимирующий квадратичный полином также является унимодальной функцией, то можно ожидать, что величина окажется приемлемой оценкой координаты точки истинного оптимума функции f(x).

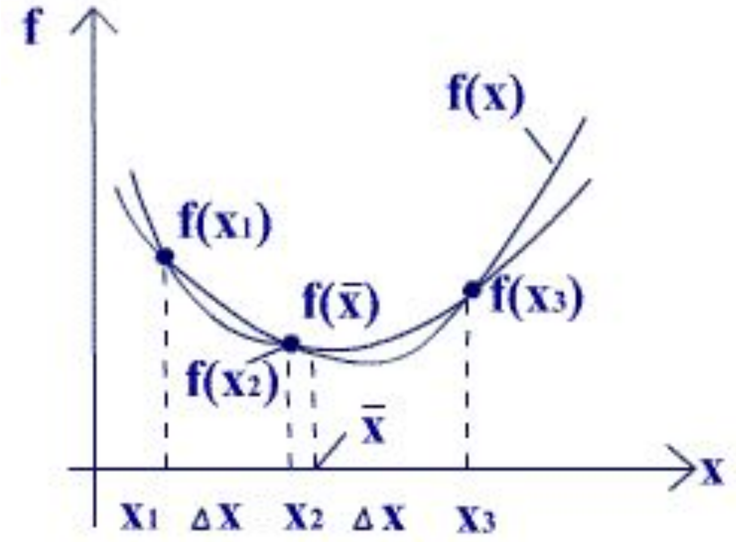
Стратегия поиска
Метод Пауэлла

- Метод Пауэлла относится к последовательным стратегиям. Задается начальная точка и с помощью пробного шага находится три точки так, чтобы они были как можно ближе к искомой точке минимума. В полученных точках вычисляются значения функции. Затем строится интерполяционный полином второй степени, проходящий через эти точки. В качестве приближения точки минимума берется точка минимума полинома. Поиск заканчивается, когда полученная точка отличается от лучшей из трех опорных точек не более чем на заданную величину.

Метод Пауэлла
Алгоритм

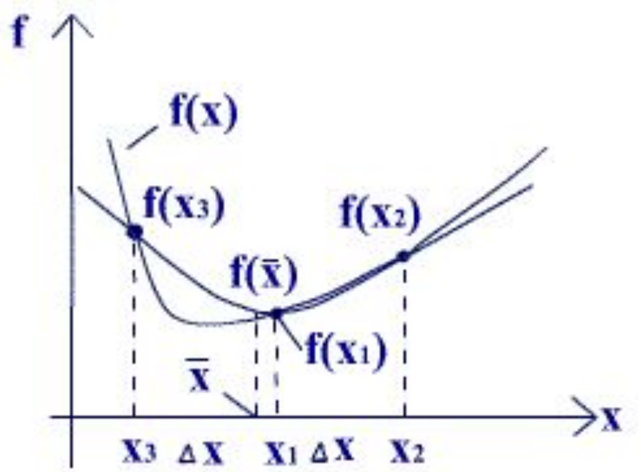
- Шаг 1. Задать начальную точку x_1, величину шага $\Delta x > 0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$- малые положительные числа, характеризующие точность.
- Шаг 2. $x_2 = x_1 + \Delta x$
- Шаг 3. Вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$.
- Шаг 4. Сравнить $f(x_1)$ и $f(x_2)$:

  Если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x_3 = x_1 + 2\Delta x$



Метод Пауэлла
Алгоритм

- Если $f(x_1) < f(x_2)$, то $x_3 = x_1 - \Delta x$



- Шаг 5. Вычислить $f(x_3)$ и найти $f_{min} = min\{f(x_1), f(x_2), f(x_3)\}$, $X_{min} = x_i, f(x_i)$=f_{min}.
- Шаг 6. По x_1, x_2, x_3 вычислить $\bar{x}$, используя формулу для оценивания с помощью квадратичной аппроксимации:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\frac{(x_2^2 - x_3^2)f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2)f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2)f(x_3)}{(x_2 - x_3)f(x_1) + (x_3 - x_1)f(x_2) + (x_1 - x_2)f(x_3)}$$

и значение функции $f(\bar{x})$.

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

Метод Пауэлла
Алгоритм

- Шаг 7. Проверка окончания:
- $\left|\frac{f_{min}-f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| < \varepsilon_1, \left|\frac{X_{min}-\bar{x}}{\bar{x}}\right| < \varepsilon_2$
- а) если оба условия выполнены, процедура закончена и $x_{min} = \bar{x}$;
- б) если хотя одно из условий не выполнено и $\bar{x} = [x_1, x_3]$, 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 5.
- в) если хотя одно из условий не выполнено и $\bar{x} \notin [x_1, x_3]$, то положить $x_1 = \bar{x}$ и перейти к шагу 2.

неопределённости, использующие информацию о $f'(x)$

- Как правило используют для нахождения корней функции высокой степени x

1. Метод Ньютона (метод касательной).
2. Метод секущих (хорд).
3. Метод средней точки.

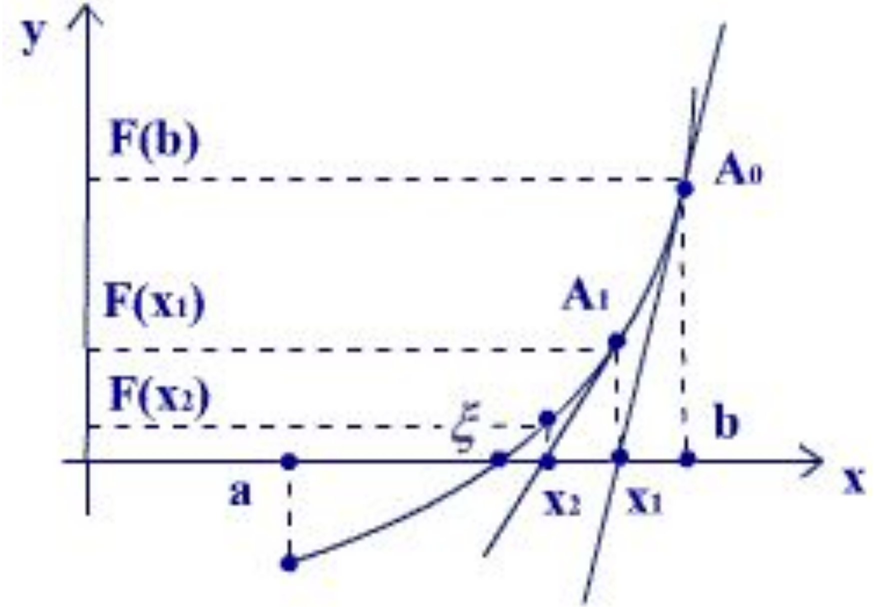
Метод Ньютона

- Одним из самых эффективных и точных методов уточнения корней нелинейного уравнения является метод Ньютона.
- Идея метода Ньютона заключается в том, что в окрестности имеющегося приближения x_n задача f(x) =0 заменяется некоторой вспомогательной линейной задачей. Эта задача выбирается так, чтобы погрешность замены имела более высокий порядок малости, чем первый (порядок малости) в окрестности имеющегося приближения. За следующее приближение принимается решение этой вспомогательной задачи.

Метод Ньютона

- Метод состоит в замене кривой y= f(x) на касательную к ней в процессе каждой итерации. Это видно из уравнения касательной, проведенной в точке $(x_n, f(x_n))$: $y - f(x_n) = f'(x_n)(x - x_n)$
- из которого расчетная формула метода Ньютона получается, если положить y=0, $x = x_{n+1}$:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$



Сходимость метода касательных квадратичная, порядок сходимости равен 2.
Таким образом, сходимость метода касательных Ньютона очень быстрая.

Метод Ньютона

- Достаточные условия сходимости определяются теоремой.
- Теорема: Пусть f(x) определена и дважды дифференцируема на отрезке [a,b], причем f(a)*f(b)< 0, а производные $f'(x)$ и $f''(x)$ сохраняют знак на отрезке [a,b]. Тогда, исходя из начального приближения x_0, удовлетворяющего неравенству $f(x_0)f''(x_0) > 0$, можно построить последовательность $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f\prime(x_n)}$, n=0,1,... сходящуюся к единственному на отрезке [a,b] решению ε уравнения f(ε)=0.
- Метод Ньютона эффективен, если выбрано хорошее начальное приближение корня и график функции имеет большую крутизну в окрестности корня. В этом случае процесс быстро сходится, со скоростью геометрической прогрессии. Если же численное значение $f'(x)$ вблизи корня мало, т.е. график почти параллелен оси 0x, то выбор метода Ньютона вряд ли разумен.
- Если бы f(x) была линейной, то метод Ньютона нашел бы корень за одну итерацию.

Метод Ньютона
Алгоритм

- Шаг 1. На отрезке [a,b] задать начальное приближение $x_0 = a$ и точность вычисления ε.
- Шаг 2. Вычислить очередное приближение по формуле:

$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, n=1,2,...

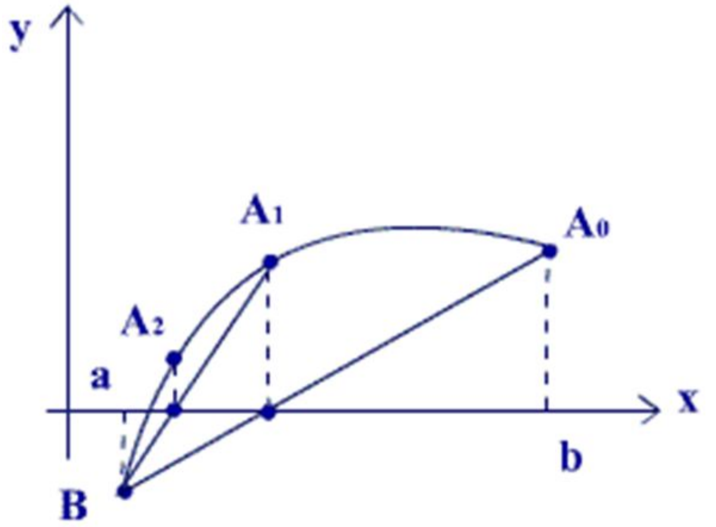
Шаг 3. Повторить процедуру 2 до тех пор, пока $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$, тогда x*=$x_n$.

Метод секущих

- Метод секущих ориентирован на нахождение корня уравнения $f(x)=0$ в интервале $[a,b]$, в котором имеются две точки, в которых $f(a)*f(b) < 0$. Между этими точками проводится секущая к кривой $y= f(x)$. В качестве следующего приближения выбирается точка пересечения этой секущей с осью абсцисс. Процесс построения секущих и нахождения точек пересечения с осью продолжается до тех пор, пока разность между двумя последовательными приближения не станет меньше ε.

Метод секущих (хорд)

- Геометрически этот способ эквивалентен замене кривой f(x) секущей A_0B, проходящей через $A_0(b, f(b))$ и $B\big(a, f(a)\big)$.
- Точка пересечения x_1 секущей A_0B с осью Ox может быть найдена из уравнения: $\frac{x-a}{b-a} = \frac{y-f(a)}{f(b)-f(a)}$. Полагая y = 0, имеем: $x_1 = a - \frac{(b-a)f(a)}{f(b)-f(a)}$.
- x_1ищем как пересечение секущей A_1B, где $A_1(x_1, f(x_1))$, с осью Ox: $\frac{x-x_1}{b-x_1} = \frac{y-f(x_1)}{f(b)-f(x_1)}$. Полагая опять y=0, имеем: $x_2 = x_1 - \frac{(b-x_1)f(x_1)}{f(b)-f(x_1)}$.
- Каждое очередное приближение к стационарной точке x_n определяется по формуле: $x_n = x_{n-1} - \frac{(b-x_{n-1})f(x_{n-1})}{f(b)-f(x_{n-1})}$.
- Процесс продолжается до тех пор, пока не окончания поиска: $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$.



Метод секущих
Алгоритм

- Шаг 1. На отрезке [a,b] задать начальное приближение $x_0 = a$ и точность вычисления ε.
- Шаг 2. Вычислить очередное приближение по формуле:

  $x_n = x_{n-1} - \frac{(b-x_{n-1})f(x_{n-1})}{f(b)-f(x_{n-1})}$, где n=1,2,...
- Шаг 3. Повторить процедуру 2 до тех пор, пока $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$, тогда x*=$x_n$.

Метод средней точки

- Основан на алгоритме исключения интервалов, на каждой итерации которого рассматривается одна пробная точка R. Если в точке R выполняется неравенство f'(R) < 0, то в следствии унимодальности функции точка оптимума не может лежать левее точки R. Аналогично, если f'(R) > 0, то интервал x>R можно исключить.
- Пусть в интервале [a,b] имеются две точки N и P, в которых производные f'(N)<0 и f'(P)>0. Оптимальная точка x* расположена между N и P.
- Шаг 1. Положить P=b, N=a, причем f'(a)<0 и f'(b)>0.
- Шаг 2. Вычислить R=(P+N)/2 и f'(R).
- Шаг 3. Если | f'(R)| < e , то закончить поиск. В противном случае, если f'(R)<0, положить N=R, и перейти к шагу 2. Если | f'(R)| > e , положить P=R и перейти к шагу 2.
- Как следует из логической структуры, процедура поиска по методу средней точки основана на исследовании только знака производной.