Лекція 11

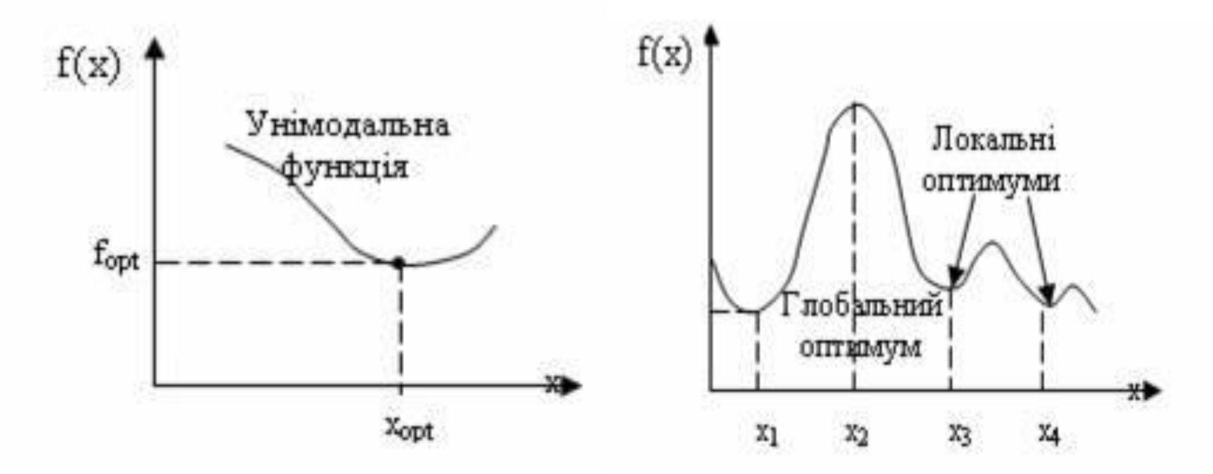
Чисельні методи оптимізації функцій

В основі проектувати нових технічних систем, а також для покращення якості функціонування існуючих систем лежить процес оптимізації. Ефективність методів оптимізації, які дозволяють вибирати найкращий варіант без перевірки всіх можливих варіантів, тісно пов'язана із широким використанням ітераційних обчислювальних схем.

11.1. Задача одновимірної оптимізації

Цільова функція – це функція, екстремум якої необхідно визначити. Нехай задана функція $f(x)$. Необхідно знайти її мінімум або максимум на інтервалі $[a,b]$ з заданою точністю ε.

Цільова функція $f(x)$ є ***унімодальною***, якщо вона має єдиний екстремум на інтервалі $[a,b]$ (рис. 11.1,а). У протилежному випадку функція може мати локальні та глобальний екстремум (рис. 11.1,б).



а) *б)*

Рис.11.1. Унімодальна функція (а) і функція з локальними та глобальним оптимумом (б)

Незалежно від типу задачі на екстремум можна використовувати ті самі алгоритми. Задачу максимізації легко звести до задачі пошуку мінімуму, змінивши знак цільової функції на протилежний. Надалі будемо вважати, що розв’язується задача на мінімум.

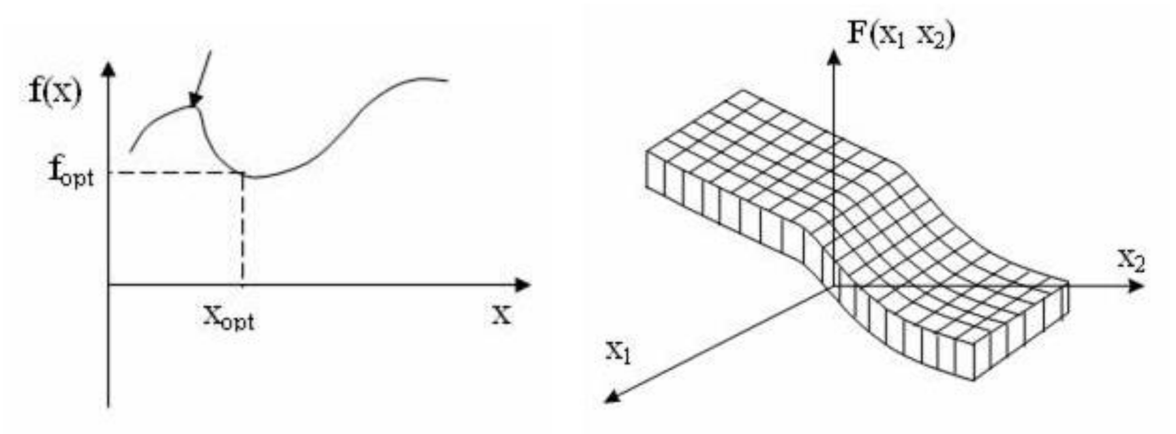
Чисельні методи, які орієнтуються на розв’язання задач безумовної оптимізації, можна розділити на три класи:

- *методи прямого пошуку*, що базуються на обчисленні тільки значень цільової функції $f(x)$;

- *градієнтні методи*, в яких використовуються точні значення перших похідних $f'(x)$ функції $f(x)$;

- *методи другого порядку*, в яких поряд з першими похідними використовуються також похідні другого порядку $f''(x)$ функції $f(x)$.

Залежно від кількості параметрів цільова функція може бути однопараметричною або багатопараметричною (Рис. 11.2).



а) *б)*

Рис.11.2. Однопараметрична (а) і багатопараметрична (б) цільові функції

Надалі розглянемо задачу одновимірної оптимізації. Задача одновимірної оптимізації полягає у визначенні проектного параметра x цільової функції $f(x)$ на інтервалі невизначеності $[a,b]$. Спочатку встановлюють межі відрізка, на якому реалізується процедура пошуку оптимуму, а потім цей інтервал постійно звужується до заданої похибки обчислень ε. Тому методи одновимірної оптимізації іноді називають методами звуження інтервалу невизначеності.

Процедура пошуку мінімуму функції $f(x)$ складається з трьох етапів:

- розбиття відрізка $[a,b]$ на відрізки $[a_i,b_i]$, в кожному з яких функція $f(x)$ унімодальна, тобто містить єдину точку локального мінімуму функції мети;
- уточнення точки мінімуму x_i^* на кожному відрізку $[a_i,b_i]$ тобто знаходження локального мінімуму із заданою точністю;
- вибір серед точок локального мінімуму точки з найменшим значенням.
-

11.2. Алгоритм відділення відрізків унімодальності

1. Виберемо n – кількість точок розбиття $[a,b]$. Визначимо крок

$$h_0 = (b-a)/n. \qquad (11.1)$$

Побудуємо точки

$$x_0 = a, \ \ x_1 = x_0 + h_0, \ \ x_2 = x_0 + 2h_0 \ . \ \ x_n = x_0 + n \cdot h = b.$$

Обчислимо значення функції $f(x)$ в отриманих точках:

$$y_0 = f(x_0), \ \ y_1 = f(x_1), \ldots, y_N = f(x_n).$$

2. Розглянемо відрізки вигляду $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ для $i = \overline{1, n-1}$. Серед цих відрізків вибираємо такі, для яких значення $f(x)$ всередині відрізка не перевищує значень на його кінцях, тобто $y_i \le y_{i-1}$, $y_i \le y_{i+1}$. До даних відрізків приєднаємо відрізок $[a, x_1]$, якщо $y_0 < y_1$ і відрізок $[x_{n-1}, b]$, якщо $y_{n-1} > y_n$. Кожний з виділених відрізків містить хоча б одну точку локального мінімуму. Число виділених відрізків позначимо K_0.

3. Процедуру виділення відрізків повторюємо для

$$h_1 = h_0/2, \ \ h_2 = h_0/4, \ldots, h_m = h_0/2^m. \qquad (11.2)$$

Якщо, починаючи з деякого кроку h_i числа K_i, $K_{i+1}, \ldots, K_{i+k-1}$ співпадають підряд k-разів, то процес відділення закінчуємо, і відрізками унімодальності вважаємо відрізки, виділені на кроці h_{i+k-1}. На практиці число n вибирається таким, щоб крок h_0 був у кілька разів більшим ніж задана точність ε, а число $k = 2 \div 5$.

Приклад 11.1. Відділити точки локального мінімуму для функції

$$f(x) = 5\cos x - 3\sin x$$

на відрізку $[2; 9{,}2]$ при $n = 12$ і $k = 2$.

Розв'язування. Обчислимо крок

$$h_0 = (9{,}2 - 2)/12 = 7{,}2/12 = 0{,}6.$$

Розіб'ємо відрізок $[2; 9{,}2]$ точками $x_i = x_0 + i \cdot h_0$, де $i = 0,1,\ldots,12$

$$x_0 = a = 2$$
$$x_1 = a + h_0 = 2 + 0{,}6 = 2{,}6$$
$$x_2 = a + 2h_0 = 2 + 1{,}2 = 3{,}2$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$x_{12} = a + 12h_0 = 2 + 7{,}2 = 9{,}2$$

Обчислимо значення функції $f(x)$ в точках x_i і внесемо їх в таблицю 11.1.

Таблиця 11.1

i	0	1	2	3	4	5	6
x_i	2	2,6	3,2	3,8	4,4	5,0	5,6
	-4,807	-5,883	-4,816	-2,119	1,321	4,295	5,773
i	7	8	9	10	11	12	
x_i	6,2	6,8	7,4	8	8,6	9,2	
$f(x)$	5,229	2,863	-0,502	-3,697	-5,597	-5,542	

Розглядаємо відрізки $[2; 3{,}2]$, $[2{,}6; 3{,}8]$, $[3{,}2; 4{,}4]$, $[3{,}8; 5{,}0]$, $[3{,}2; 4{,}4]$. Виберемо з них ті, для яких значення всередині відрізка не перевищує значення функції на його кінцях. Наприклад, для відрізка $[2; 3{,}2]$:

$$-5{,}883 = f(2{,}6) < f(2) = -4{,}807,$$
$$-5{,}883 = f(2{,}6) < f(3{,}2) = -4{,}816.$$

Таких відрізків отримаємо два: $[2;3,2]$ з центром в точці $x = 2,6$ і $[8;9,2]$ з центром в точці $x = 8,6$. На рисунку 11.4 ці відрізки виділені. Отже, $K_0 = 2$.

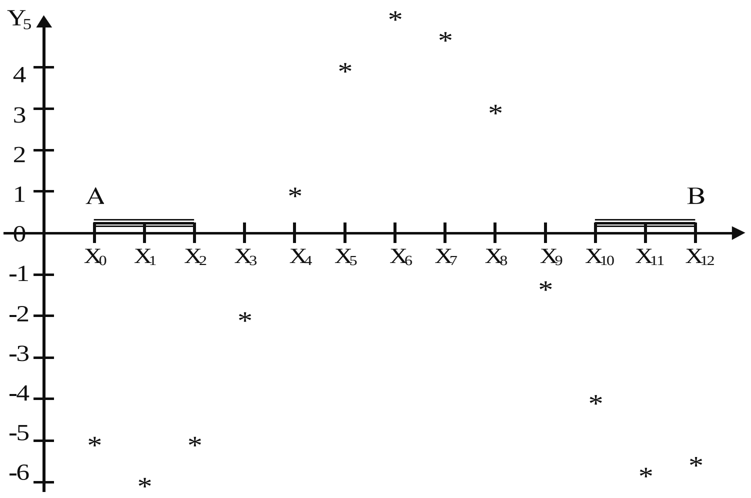


Рис.11.3. Виділення відрізків унімодальності

Проведемо обчислення з кроком $h_1 = 0,3$ і результати внесемо в таблицю.

Таблиця 11.2

i	x_i	$f(x_i)$	i	x_i	$f(x_i)$
0	2	-4,807	12	5,6	5,773
1	2,3	-5,568	13	5,9	5,757
2	2,6	-5,883	14	6,2	5,229
3	2,9	-5,572	15	6,5	4,24
4	3,2	-4,816	16	6,8	2,863
5	3,5	-3,627	17	7,1	1,248
6	3,8	-2,119	18	7,4	-0,502
7	4,1	-0,421	19	7,7	-2,199
8	4,4	1,321	20	8,0	-3,697
9	4,7	2,937	21	8,3	-4,863
10	5	4,295	22	8,6	-5,597
11	5,3	5,266	23	8,9	-5,83
			24	9,2	-5,542

У даному випадку отримано два відрізки: $[2,3; 2,9]$ з центром в точці $x = 2,6$ і $[8,6; 9,2]$ з центром в точці $x = 8,9$. Число відрізків унімодальності $K_1 = 2$. Оскільки $K_0 = K_1 = 2$, то закінчуємо процес відділення. Отже, отримано два відрізки унімодальності: $[2,3; 2,9]$ і $[8,6; 9,2]$.

11.3. Чисельні методи одновимірної оптимізації

Основними чисельними методами одновимірної оптимізації є метод рівномірного пошуку, метод дихотомії, метод золотого перерізу та метод Фібоначчі.

Метод рівномірного пошуку – це найбільш непродуктивний метод розв’язання задачі оптимізації. Він полягає в тому, що проводять табуляцію функції $f(x)$ із деяким кроком зміни x і визначають її найменше значення.

11.4. Метод поділу відрізка навпіл

Цей метод дозволяє виключити половину поточного інтервалу на кожній ітерації.

1. Ввести значення A, B, ε.

2. Обчислити $x_m = (A + B)/2$.

3. Обчислити значення функції $f_m = f(x_m)$.

4. Обчислити значення $L = B - A$.

5. Якщо $L < \varepsilon$, процес завершити, точкою мінімуму вважати x_m.

6. Обчислити значення

$$x_1 = a + L/4, \quad f_1 = f(x_1),$$
$$x_2 = b - L/4, \quad f_2 = f(x_2).$$

7. Якщо $f_1 < f_m$, то $B = x_m$, $x_m = x_1$, $f_m = f_1$; перейти до п.4;

   якщо $f_2 < f_m$, то $A = x_m$, $x_m = x_2$, $f_m = f_2$; перейти до п.4.

8. Виконати $A = x_1$, $B = x_2$; перейти до п.4.

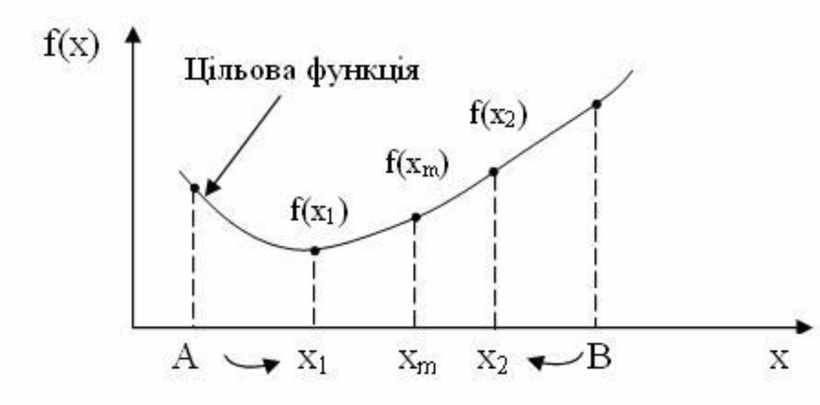


Рис.11.3. Схема алгоритму

Приклад 11.2. З точністю $\varepsilon = 0{,}1$ знайти точку локального мінімуму функції $f(x) = 5\cos x - 3\sin x$ на відрізку унімодальності $[8{,}6; 9{,}2]$

$$a = 8{,}6;\quad b = 9{,}2 \qquad h = (9{,}2 - 8{,}6)/4 = 0{,}6/4 = 0{,}15.$$

Розділимо початковий відрізок на чотири частини точками

$$x_0 = 8{,}6,\quad x_1 = 8{,}75,\quad x_2 = 8{,}9,\quad x_3 = 9{,}05,\quad x_4 = 9{,}2.$$

Обчислимо значення даної функції в цих точках і занесемо їх в таблицю.

Таблиця 11.3

i	0	1	2	3	4
x_i	8,6	8,75	8,9	9,05	9,2
$f(x_i)$	-5,597	-5,778	-5,83	-5,751	-5,542

Значення $f(8{,}9) = -5{,}83$ є найменшим, на наступному кроці розглядаємо відрізок $[8{,}75; 9{,}05]$. Його довжина рівна $0{,}3 > 2\varepsilon$. Тому процедуру повторюємо. Обчислимо

$$h = (9{,}05 - 8{,}75)/4 = 0{,}3/4 = 0{,}075.$$

Розділимо відрізок на чотири частини точками $x_i = 8{,}75 + i \cdot h$. Значення x_i і $f(x_i)$ занесемо в таблицю.

Таблиця 11.4

i	0	1	2	3	4
x_i	8,6	8,75	8,9	9,05	9,2
$f(x_i)$	-5,597	-5,778	-5,83	-5,751	-5,542

$f(8{,}9) = -5{,}83$ є найменшим значенням, тому новий відрізок $[8{,}825;8{,}977]$. Оскільки його довжина $8{,}977 - 8{,}825 = 0{,}152 < 2\varepsilon$, то як точку мінімуму вибираємо $x^* = 8{,}9$, мінімальне значення - -5,83.

11.5. Метод золотого перетину

Цей метод є найбільш ефективним. Для досягнення заданої точності він потребує найменшої кількості обчислень цільової функції $f(x)$.

Золотий перетин відрізка $[a, b]$ - його поділ на дві частини таким чином, що відношення довжини всього відрізка до довжини більшої його частини дорівнює відношенню довжини більшої частини до довжини меншої частини:

$$\frac{b-a}{b-x} = \frac{b-x}{x-a}, \qquad (11.3)$$

звідки $\quad x_1 = a + (1-\alpha)(b-a) \;\; x_2 = a + \alpha(b-a),$

де $\alpha = \left(\sqrt{5}-1\right)/2 \approx 0{,}618034$.

Рис.11.4. Схема методу золотого перетину

Точка x_1 виконує золотий перетин відрізка $[a, x_2]$, а точка x_2 - золотий перетин відрізка $[x_1, b]$.

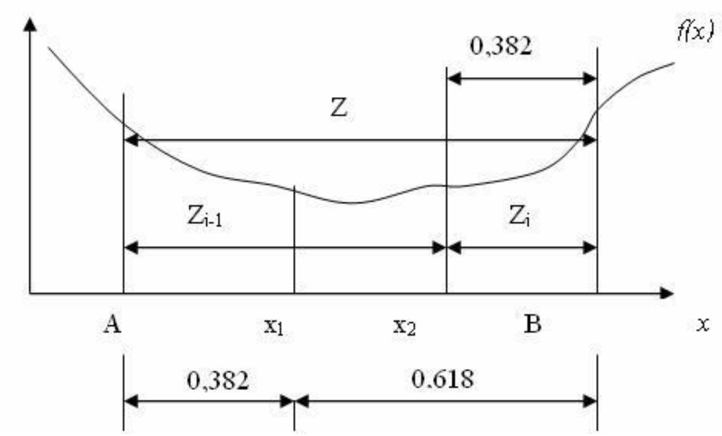


Рис.11.5. Вибір нового інтервалу в методі золотого перетину

Алгоритм методу золотого перетину

1. Задати параметри: a, b, ε. Обчислити $l = b - a$.

2. Якщо $l < \varepsilon$, то завершити процес. За точку мінімуму вважати значення $x = (a + b)/2$.

3. Обчислити $x_1 = a + (1 - \alpha)l$, $x_2 = a + \alpha l$.

4. Обчислити нове значення l за правилом: $l = \alpha l$.

5. Якщо $f(x_1) < f(x_2)$, то продовжуємо пошук мінімуму на проміжку $[a, x_2]$, тобто $b = x_2$ $x_2 = x_1$, $x_1 = a + (1 - \alpha)l$, якщо ні, то на проміжку $[x_1, b]$, тобто $a = x_1$, $x_1 = x_2$, $x_2 = a + \alpha l$.На цих проміжках вже є одна точка, що робить золотий перетин, потрібно визначити іншу.

6. Перейти до п.2.

Продовжуємо описаний алгоритм доти, поки інтервал невизначеності $l < \varepsilon$. Зауважимо, що на кожному кроці необхідно тільки один раз обчислювати значення функції $f(x)$.

При $n > 2$ ефективність методу золотого перетину вища, ніж у методу дихотомії, оскільки при кожному наступному обчисленні цільової функції інтервал невизначеності скорочується в 1/0,618 разів. Після обчислення N значень цільової функції коефіцієнт дроблення інтервалу невизначеності складає $k = 0.618(n - 1)$.

Метод золотого перетину має цікаву закономірність: найбільше скорочення наступних інтервалів невизначеності досягається при обчисленні цільової функції в точках, які рівновіддалені від його центру.

11.6. Метод Фібоначчі

Припустимо, що потрібно визначити мінімум цільової функції якнайточніше, тобто з найменшим можливим інтервалом невизначеності, але при цьому можна виконати тільки n обчислень функції.

Нехай заданий інтервал невизначеності $[x_1, x_3]$ і відоме значення функції $f(x_2)$ всередині цього інтервалу (Рис. 11.6).

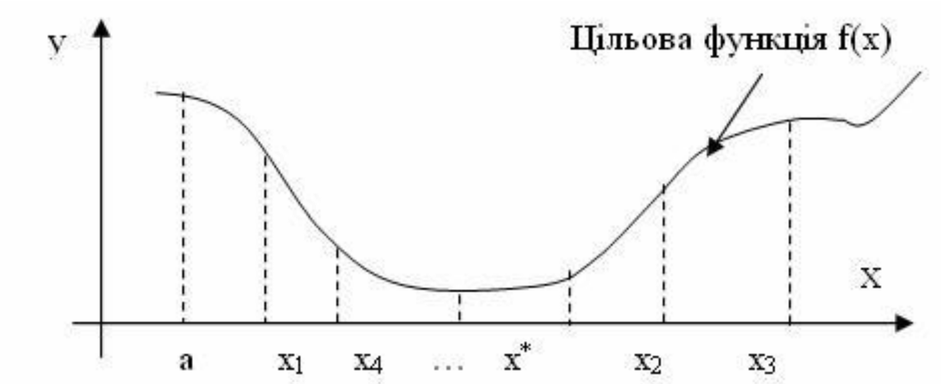


Рис.11.6

Припустимо $x_2 - x_1 = L$ і $x_3 - x_2 = R$, причому $L > R$, як показано на рис. 11.6, і ці значення будуть фіксовані, якщо відомі x_1, x_2, x_3. Якщо x_4 знаходиться на інтервалі (x_1, x_2), то:

1. Якщо $f(x_4) < f(x_2)$, то новим інтервалом невизначеності буде (x_1, x_2) довжиною $x_2 - x_1 = L$.

2. Якщо $f(x_4) > f(x_2)$, те новим інтервалом невизначеності буде (x_4, x_3) довжиною $x_3 - x_4$.

Виберемо x_4 таким чином, щоб зробити мінімальною найбільшу з довжин $x_3 - x_4$ і $x_2 - x_1$. Досягнути цього можна, зробивши довжини $x_3 - x_4$ і $x_2 - x_1$ рівними, тобто помістивши x_4 всередині інтервалу симетрично відносно точки

x_2, що вже лежить всередині інтервалу. Будь-яке інше положення точки x_4 може призвести до того, що отриманий інтервал буде більший ніж L. Якщо виявиться, що можна виконати ще одне обчислення функції, то слід застосувати описану процедуру до інтервалу (x_1, x_2), в якому вже є значення функції, обчислене в точці x_2. Потрібно помістити наступну точку всередині інтервалу невизначеності симетрично відносно точки, яка вже знаходиться там.

На n-му обчисленні n-у точку потрібно помістити симетрично відносно до $(n-1)$-ї точки. Для того, щоб отримати найбільше зменшення інтервалу на даному етапі, слід поділити навпіл попередній інтервал. Тоді точка x_n буде співпадати з точкою x_{n-1}. Однак при цьому не одержується жодної нової інформації. Звичайно точки x_{n-1} і x_n знаходяться одна від одної на достатній відстані, щоб визначити, в якій половині, лівій чи правій, знаходиться інтервал невизначеності. Вони розміщуються на відстані $\varepsilon/2$ по обидві сторони від середини відрізка L_{n-1}. Можна задати величину ε або вибрати цю величину рівній мінімально можливій відстані між двома точками.

Інтервал невизначеності буде мати довжину L_n, отже, $L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon$.

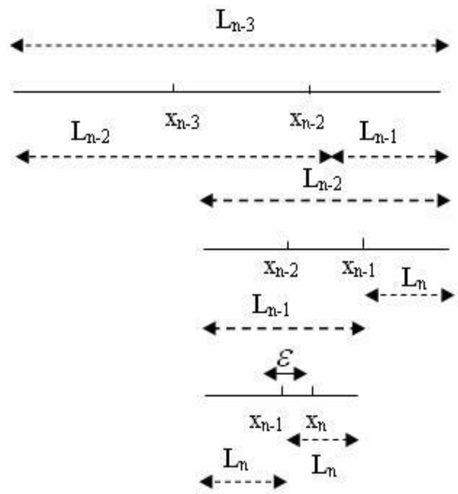


Рис.11.7. Геометрична інтерпретація ітераційного процесу Фібоначчі

На попередньому етапі точки x_{n-1} і x_{n-2} повинні бути поміщені симетрично всередині інтервалу з L_{n-2} на відстані L_{n-1} від кінців цього інтервалу. Отже, $L_{n-2} = L_{n-1} + L_n$.

Зауваження. З рисунку видно, що на передостанньому етапі x_{n-2} залишається внутрішньою точкою. Аналогічно $L_{n-3} = L_{n-2} + L_{n-1}$. В загальному випадку $L_{j-1} = L_j + L_{j+1}$ при $1 < j < n$. Маємо:

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

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

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

$$L_{n-4} = L_{n-3} + L_{n-2} = 8L_n - 3\varepsilon, \ \ldots$$

Якщо визначити послідовність чисел Фібоначчі наступним чином:

$$F_0 = 1,\ F_1 = 1,\ \ldots,\ F_k = F_{k-1} + F_{k-2}, \qquad (k = 2,3,\ldots),$$

то

$$L_{n-j} = F_{j+1}L_n - F_{j-1}\varepsilon, \qquad j = \overline{1, n-1}.$$

Оскільки початковий інтервал (a,b) має довжину $L_1 = b - a$, то $L_1 = F_N L_N - \varepsilon \cdot F_{N-2}$. Тобто $L_N = \dfrac{L_1}{F_N} + \varepsilon \dfrac{F_{N-1}}{F_N}$.

Як бачимо, метод Фібоначчі, названий так через появу в процесі пошуку чисел Фібоначчі, є ітераційною процедурою.

В процесі пошуку інтервалу (x_1, x_2) з точкою x_2, що вже лежить в цьому інтервалі, наступна точка x_4 завжди вибирається такою, щоб виконувалась одна з умов

$x_3 - x_4 = x_2 - x_1$ або $x_4 - x_1 = x_3 - x_2$, тобто $x_4 = x_1 - x_2 + x_3$.

11.7. Порівняння методів оптимізації

Критеріями порівняння чисельних методів пошуку екстремуму функції є їх ефективність і універсальність.

Ефективність алгоритму - число обчислень функції, необхідне для досягнення необхідного звуження інтервалу невизначеності. Найкращим в цьому відношенні є метод Фібоначчі, а найгіршим – метод загального пошуку. Як правило, методи Фібоначчі і золотого перетину, володіють високою ефективністю, найбільш підходять для розв’язку одновимірних унімодальних задач оптимізації.

Універсальність алгоритму - можливість його застосування для розв’язку різноманітних задач. В цьому відношенні метод Фібоначчі, поступається іншим, так як потребує окремого обчислення положення точок, в яких будуть визначатися значення цільової функції на кожному новому кроці. Цим доводиться розплачуватися за підвищення ефективності методу.