Метод квадратичной аппроксимации

Теоретические основы

Квадратичная аппроксимация 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.

При реализации метода оценивания с использованием квадратичной аппроксимации предполагается, что в ограниченном интервале можно аппроксимировать функцию квадратичным полиномом, а затем использовать построенную аппроксимационную схему для оценивания координаты точки истинного минимума функции.

Теоретические основы

Если задана последовательность точек x_1, x_2, x_3 и известны соответствующие этим точкам значения функции f_1, f_2, f_3, то можно определить постоянные величины a_0, a_1, a_2 таким образом, что значения квадратичной функции

$$q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$$

совпадут со значениями рассматриваемой функции $f(x)$ в следующих точках x_1, x_2, x_3.

Вычислим $q(x)$ в каждой из трех заданных точек. Прежде всего

$$f_1 = f(x_1) = q(x_1) = a_0,$$

тогда

$$a_0 = f_1.$$

Далее, поскольку

$$f_2 = f(x_2) = q(x_2) = f_1 + a_1(x_2 - x_1),$$

получим

$$a_1 = (f_2 - f_1) / (x_2 - x_1).$$

Теоретические основы

Наконец, при $x = x_3$:

$$f_3 = f(x_3) = q(x_3) = f_1 + (f_2 - f_1)/(x_2 - x_1)(x_3 - x_1) +$$
$$+ a_2(x_3 - x_1)(x_3 - x_2).$$

Решая последнее уравнение относительно a_2, получаем:

$$a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2}\left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}\right).$$

Таким образом, найти значения параметров a_0, a_1, a_2 можно по трем заданным точкам и соответствующим значениям функции из аппроксимирующего квадратичного полинома с помощью приведенных выше формул.

Теоретические основы

Если точность аппроксимации исследуемой функции в интервале от x_1 до x_3 с помощью квадратичного полинома оказывается достаточно высокой, то в соответствии с предложенной стратегией поиска построенный полином можно использовать для оценивания координаты точки оптимума. Стационарные точки функции одной переменной определяются путем приравнивания к нолю ее первой производной и последующего нахождения корней полученного таким образом уравнения. В данном случае из уравнения

$$\frac{dq(x)}{dx} = a_1 + a_2(x - x_2) + a_2(x - x_1)$$

можно получить

$$\bar{x} = \frac{x_2 + x_1}{2} - \frac{a_1}{2a_2}.$$

Поскольку функция $f(x)$ на рассматриваемом интервале обладает свойством унимодальности, а аппроксимирующий квадратичный полином также является унимодальной функцией, можно ожидать, что величина $\bar{x}$ окажется приемлемой оценкой координаты точки истинного оптимума x^*.

Стратегия поиска

Стратегия поиска

Стратегия поиска

Стратегия поиска

Метод квадратичной аппроксимации (метод Пауэлла) относится к методам точечного оценивания и последовательной стратегии. Задается начальная точка, и с помощью пробного шага находятся 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 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 (первую) точку x_1, величину шага по оси x $\Delta x > 0$, ε_1 и ε_2 – малые положительные значения, характеризующие точность.

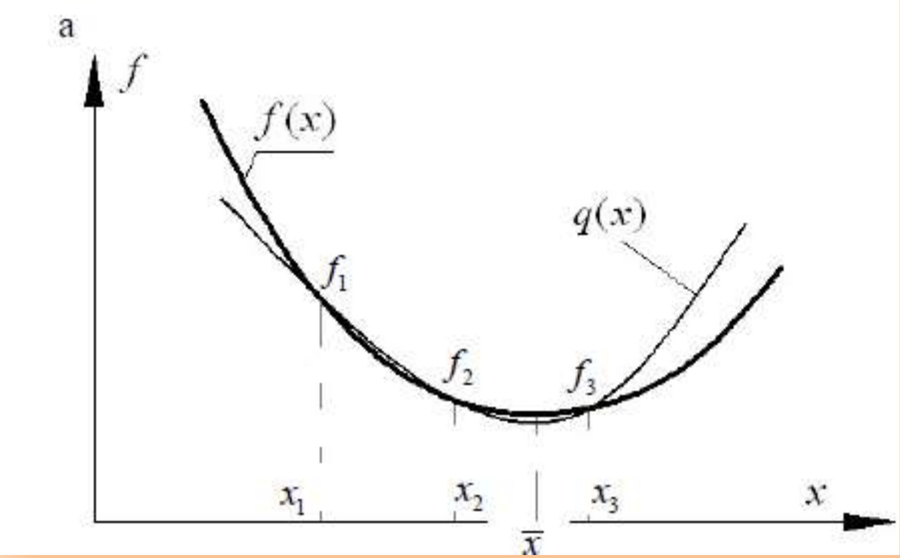
Шаг 2. Вычислить вторую точку: $x_2 = x_1 + \Delta x$.

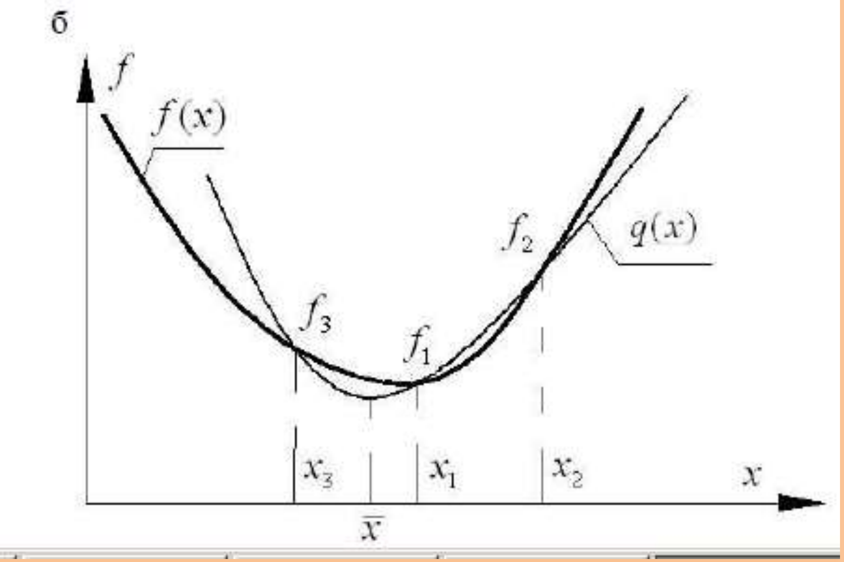
Шаг 3. Вычислить значения функции в точках $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

Шаг 4. Сравнить точки $f(x_1)$ и $f(x_2)$:

а) если $f(x_1) > f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 + 2\Delta x$ (рис. 2.5, а);

б) если $f(x_1) \leq f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 - \Delta x$ (рис. 2.5, б).





Алгоритм

Шаг 5. Вычислить $f(x_3) = f_3$.

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

Шаг 7. По точкам x_1, x_2, x_3 вычислить точку минимума $\bar{x}$ квадратичного интерполяционного полинома:

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

и величину функции $f(\bar{x})$.

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

Алгоритм

Шаг 8. Проверить выполнение условий окончания расчета:

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

а) если оба условия выполняются, закончить поиск $x^* = \bar{x}$;

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

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

Пример

Минимизировать функцию $f(x) = 2x^2 + \dfrac{16}{x}$, *используя метод квадратичной аппроксимации (метод Пауэлла). Начальная точка* $x_1 = 1$, *длина шага* $\Delta x = 1$, *относительная точность изменения функции* $\varepsilon_1 = 0{,}003$, *относительная точность изменения координаты* $\varepsilon_2 = 0{,}03$.

1^0. Задать начальную точку $x_1 = 1$, величину шага $\Delta x = 1$, условие окончания расчета для изменения значения функции $\varepsilon_1 = 0{,}003$ и координаты $\varepsilon_2 = 0{,}03$.

2^0. Вычислить значение второй точки: $x_2 = x_1 + \Delta x = 2$.

3^0. Вычислить значение функции в точках x_1 и x_2: $f(x_1) = 18$, $f(x_2) = 16$.

Пример

4^0. Сравнить значения функции в точках x_1 и x_2: $f(x_1) > f(x_2)$, и рассчитать третью точку: $x_3 = x_1 + 2\Delta x = 1 + 2 = 3$.

5^0. Вычислить значение функции в точке x_3: $f(x_3) = 23{,}33$.

6^0. Найти $F_{\min} = \min\{f_1, f_2, f_3\}$ и $x_{\min} = x_i : F_{\min}$:

$$F_{\min} = \min\{18; 16; 23{,}33\} = 16, \quad x_{\min} = x_2 = 2.$$

7^0. По точкам x_1, x_2, x_3 вычислить точку минимума $\bar{x}$ квадратичного интерполяционного полинома и значение функции $f(\bar{x})$ в этой точке:

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

$$= \frac{1}{2}\frac{(4-9)18 + (9-1)16 + (1-4)23{,}33}{(2-3)18 + (3-1)16 + (1-2)23{,}33} = 1{,}714,$$

где $f(\bar{x}) = 15{,}21$.

Пример

8^0. Проверить условие окончания расчета по критерию ε_1:

$$\left|\frac{F_{\min} - f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| = \left|\frac{16 - 15,210}{15,210}\right| = 0,0519 > \varepsilon_1 \ (\varepsilon_i = 0,003).$$

Условие окончания расчета не выполнено.

Определить и расположить новые расчетные точки в порядке возрастания: $\bar{x}$ – наилучшая минимальная точка, слева от нее располагается точка $x_1 = 1$, справа – $x_2 = 2$. Обозначим их в обычном порядке: $x_1 = 1$, $x_2 = \bar{x} = 1,714$, $x_3 = 2$. Значения функций в этих точках равны: $f(x_1) = 18$, $f(x_2) = 15,21$, $f(x_3) = 16$.

Продолжить расчет. Перейти к шагу 6.

6^1. Найти $F_{\min} = \min\{f_1, f_2, f_3\}$ и $x_{\min} = x_i$:

$$F_{\min} = \min\{18;\ 15,21;\ 16\} = 15,21, \ x_{\min} = x_2 = 1,714.$$

Пример

7^1. По точкам x_1, x_2, x_3 вычислить точку минимума $\bar{x}$ квадратичного интерполяционного полинома и значение функции $f(\bar{x})$ в этой точке:

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

$$= \frac{1}{2}\frac{\left(1{,}714^2 - 2^2\right)18 + \left(2^2 - 1^2\right)15{,}21 + \left(1^2 - 1{,}714^2\right)16}{(1{,}714 - 2)18 + (2 - 1)15{,}21 + (1 - 1{,}714)16} = 1{,}65,$$

$$f(\bar{x}) = 15{,}142.$$

8^1. Проверить условие окончания расчета по критерию ε_1:

$$\left|\frac{F_{\min} - f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| = \left|\frac{15{,}210 - 15{,}142}{15{,}142}\right| = 0{,}0045 > \varepsilon_1 \ (\varepsilon_i = 0{,}003).$$

Условие окончания расчета не выполнено.

Пример

Определить и расположить новые расчетные точки в обычном порядке: $\bar{x}$ – наилучшая минимальная точка, слева от нее располагается точка $x_1 = 1$, справа – $x_2 = 1{,}714$. Обозначим их в обычном порядке: $x_1 = 1$, $x_2 = \bar{x} = 1{,}65$, $x_3 = 1{,}714$. Значения функций в этих точках: $f(x_1) = 18$, $f(x_2) = 15{,}142$, $f(x_3) = 15{,}21$.

6^2. Найти $F_{\min} = \min\{f_1, f_2, f_3\}$ и $x_{\min} = x_i$:

$$F_{\min} = \min\{18;\ 15{,}142;\ 15{,}21\} = 15{,}142,\ x_{\min} = x_2 = 1{,}65.$$

7^2. По точкам x_1, x_2, x_3 вычислить точку минимума $\bar{x}$ квадратичного интерполяционного полинома и значение функции $f(\bar{x})$ в этой точке:

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

$$= \frac{1}{2}\frac{\left(1{,}65^2 - 1{,}714^2\right)18 + \left(1{,}714^2 - 1^2\right)15{,}142 + \left(1^2 - 1{,}65^2\right)15{,}21}{(1{,}65 - 1{,}714)18 + (1{,}714 - 1)15{,}142 + (1 - 1{,}65)15{,}21} = 1{,}6125,$$

$$f(\bar{x}) = 15{,}123.$$

Пример

8^2. Проверить условие окончания расчета по критерям ε_1 и ε_2:

$$\left|\frac{F_{\min} - f(\bar{x})}{f(\bar{x})}\right| = \left|\frac{15{,}142 - 15{,}123}{15{,}123}\right| = 0{,}0013 < \varepsilon_1 \ (\varepsilon_i = 0{,}003);$$

$$\left|\frac{x_{\min} - \bar{x}}{\bar{x}}\right| = \left|\frac{1{,}65 - 1{,}6125}{1{,}6125}\right| = 0{,}023 < \varepsilon_2 \ (\varepsilon_i = 0{,}03).$$

Условие окончания расчета выполняется. Расчет завершен. Точка минимума – $x^* \cong \bar{x} = 1{,}6125$.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ОДНОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ МЕТОДОМ КВАДРАТИЧНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

В этом методе целевая функция сначала заменяется квадратичным полиномом. После этого положение минимума целевой функции определяется по положению минимума полинома, что значительно проще.

Пусть целевая функция известна в трех точках x_1, x_2, x_3, то есть даны значения функции $f(x_1)$, $f(x_2)$,$f(x_3)$.

Заменим целевую функцию в окрестности этих точек квадратичным полиномом ax^2+bx+c, т.е. коэффициенты этого полинома можно определить из системы трех линейных уравнений, которые надо разрешить относительно a,b,c:

$$\begin{cases} ax_1^2 + bx_1 + c = f(x_1) \\ ax_2^2 + bx_2 + c = f(x_2) \\ ax_3^2 + bx_3 + c = f(x_3) \end{cases}$$

При этом непосредственно определять численные значения коэффициентов a, b, c нет необходимости. В задаче нужно только знать положение минимума квадратичного полинома. Известно, что минимум квадратичного

полинома расположен в точке $x^* = -\dfrac{b}{2a}$

при $a \rangle 0$

Решаем эту систему с помощью определителей (методом Крамера):

$$\Delta = \begin{vmatrix} {x_1}^2 & x_1 & 1 \\ {x_2}^2 & x_2 & 1 \\ {x_3}^2 & x_3 & 1 \end{vmatrix} = (x_2 - x_1)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)$$

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} f(x_1) & x_1 & 1 \\ f(x_2) & x_2 & 1 \\ f(x_3) & x_3 & 1 \end{vmatrix} = f(x_1)(x_3 - x_2) + f(x_2)(x_1 - x_3) + f(x_3)(x_2 - x_1)$$

$$\Delta_2 = ({x_2}^2 - {x_3}^2) f(x_1) + ({x_3}^2 - {x_1}^2) f(x_2) + ({x_1}^2 - {x_2}^2) f(x_3)$$

$$x^* = -\frac{b}{2a}; a = \frac{\Delta_1}{\Delta}; b = \frac{\Delta_2}{\Delta};$$

$$x^* = -\frac{1}{2}\frac{\Delta_2}{\Delta_1}; (1)$$

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

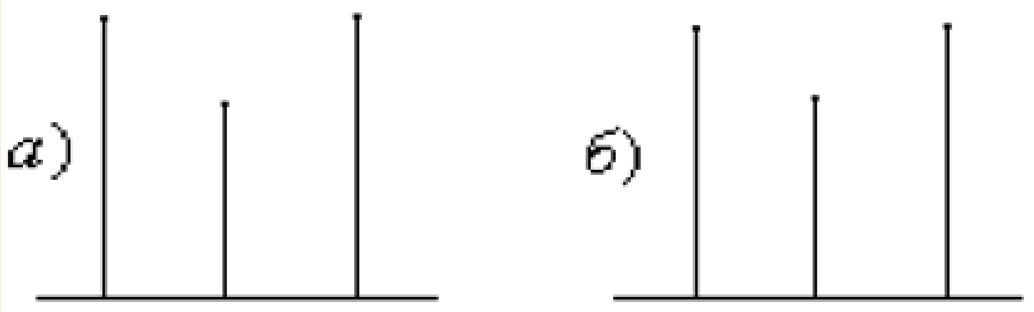
Рассмотрим аспекты практической реализации этого метода.

Пусть задана унимодальная функция f(x), точка x_0 -начальная аппроксимация положения минимума и h - шаг, величина которого имеет тот же порядок, что и расстояние от точки x_0 до истинного минимума. Вычислительные процедуры в этом случае содержат следующие этапы:

1.Вычисляем $f(x_0)$ и $f(x_0+h)$

2.а). Если $f(x_0)<f(x_0+h)$, то в качестве третьей аппроксимирующей точки выбирается точка (x_0-h) и вычисляется $f(x_0-h)$;

б). Если $f(x_0)>f(x_0+h)$, то выбирается точка (x_0+2h) и вычисляется $f(x_0+2h)$.



отбрасываем точку x_3 отбрасываем точку x_4

После проведения некоторого количества вычислений абсциссы x_1, x_2, x_3 точек, а также ординаты этих точек $f(x_1), f(x_2), f(x_3)$ будут достаточно близки друг к другу, поэтому относительная погрешность вычислений будет достаточно большой. Поэтому для вычислений на второй и последующих интерполяциях используется формула в преобразованном виде:

$$x^* = \frac{1}{2}\frac{f(x_1)(x_2^2 - x_3^2) + f(x_2)(x_3^2 - x_1^2) + f(x_3)(x_1^2 - x_2^2)}{\left[f(x_1)(x_2 - x_3) + f(x_2)(x_3 - x_1) + f(x_3)(x_1 - x_2)\right]} =$$

$$= \frac{1}{2[\ldots]}\left[f(x_1)(x_2 - x_3)(x_2 + x_1 - x_1 + x_3) + f(x_2)(x_3 - x_1)(x_3 + x_2 - x_2 + x_1) +\right.$$

$$\left. + f(x_3)(x_1 - x_2)(x_1 + x_2)\right] = \frac{1}{2[\ldots]}\left\{\left[f(x_1)(x_2 - x_3)(x_1 + x_2) +\right.\right.$$

$$\left. + f(x_2)(x_3 - x_1)(x_1 + x_2) + f(x_3)(x_1 - x_2)(x_1 + x_2)\right] +$$

$$\left.+\left[f(x_1)(x_2 - x_3)(x_3 - x_1) + f(x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)\right]\right\} =$$

$$= \frac{x_1 + x_2}{2} + \frac{1}{2[\ldots]}\left[(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)\left(f(x_2) - f(x_1)\right)\right];$$