Глава 5. МЕТОДЫ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА

5.1. МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

5.1.1. Общая постановка задачи и стратегии поиска

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

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

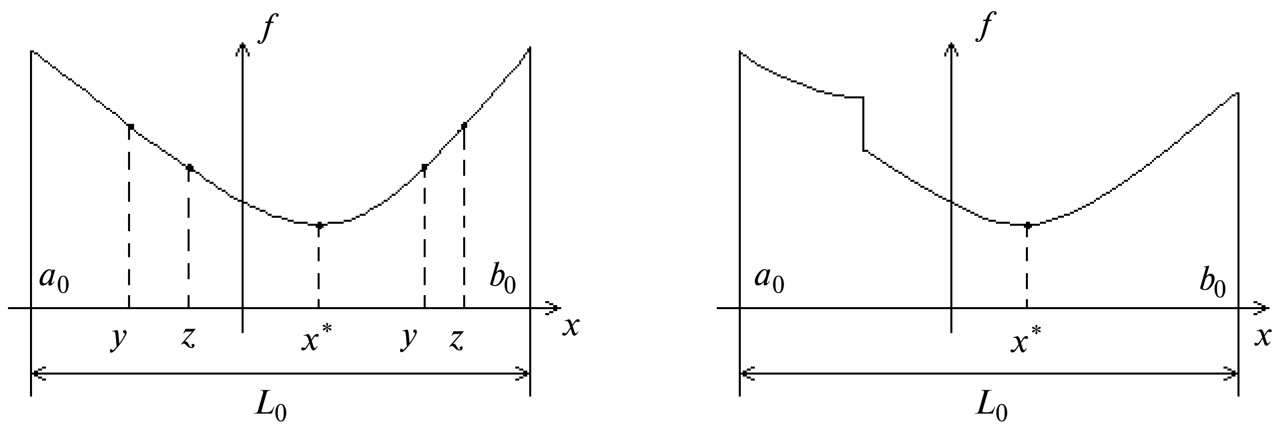
Поставленная *задача одномерной минимизации* может быть решена с помощью необходимых и достаточных условий безусловного экстремума (см. гл. 2). Однако проблема получения решения уравнения $\frac{df(x)}{dx} = 0$ может оказаться весьма сложной. Более того, в практических задачах функция $f(x)$ может быть не задана в аналитическом виде или часто неизвестно, является ли она дифференцируемой. Поэтому получение численного решения поставленной задачи является актуальным.

З а м е ч а н и я 5.1.

1. Для методов одномерной минимизации типично задание априорной информации о положении точки минимума с помощью начального *интервала неопределенности* $L_0 = [a_0, b_0]$ (рис. 5.1). 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 5.1. 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. Если $a_0 \le y < z < x^*$, то $f(y) > f(z)$, а если $x^* < y < z \le b_0$, то $f(y) < f(z)$ (рис. 5.1, *а*).



а *б*

Рис. 5.1

Отметим, что непрерывная строго выпуклая функция является унимодальной. Однако определению 5.1 могут удовлетворять и функции, не являющиеся непрерывными и выпуклыми (рис. 5.1, *б*).

3. Методы одномерной минимизации широко применяются в методах первого и второго порядков для нахождения оптимальной величины шага (см. гл. 6 и 7). При этом левая граница начального интервала неопределенности, как правило, совпадает с началом координат, т.е. $a_0 = 0$.

Стратегии поиска. Существуют две принципиально различные стратегии выбора точек, в которых производится вычисление значений функции. Если все точки задаются заранее, до начала вычислений, – это *пассивная* (*параллельная*) *стратегия*. Если эти точки выбираются последовательно в процессе поиска с учетом результатов предыдущих вычислений,– это *последовательная стратегия*. Примером реализации пассивной стратегии является метод равномерного поиска (см. разд. 5.1.2).

Последовательную стратегию можно реализовать следующими способами:

- применением квадратичной и кубической интерполяции, где по нескольким вычисленным значениям функции строится интерполяционный полином, а его минимум указывает на очередное приближение искомой точки экстремума (см. разд. 5.1.7 и 6.7);
- построением последовательности вложенных друг в друга интервалов, каждый из которых содержит точку минимума (см. разд. 5.1.3 – 5.1.6).

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 (см. определение 5.1).

2. Уменьшение интервала неопределенности.

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

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

З а м е ч а н и я 5.2.

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

2. Для эвристического выбора начального интервала неопределенности можно применить *алгоритм Свенна* (Swann):

1) задать произвольно параметры: x^0 – некоторую точку и $t > 0$ – величину шага. Положить $k = 0$;

2) вычислить значение функции в трех точках: $x^0 - t$, x^0, $x^0 + t$;

3) проверить условие окончания:

а) если $f(x^0 - t) \geq f(x^0) \leq f(x^0 + t)$, то начальный интервал неопределенности найден: $[a_0, b_0] = [x^0 - t, x^0 + t]$;

б) если $f(x^0 - t) \leq f(x^0) \geq f(x^0 + t)$, то функция не является унимодальной (см. определение 5.1), а требуемый интервал неопределенности не может быть найден. Вычисления при этом прекращаются (рекомендуется задать другую начальную точку x^0);

в) если условие окончания не выполняется, то перейти к шагу 4;

4) определить величину Δ :

а) если $f(x^0 - t) \ge f(x^0) \ge f(x^0 + t)$, то $\Delta = t$; $a_0 = x^0$; $x^1 = x^0 + t$; $k = 1$;

б) если $f(x^0 - t) \le f(x^0) \le f(x^0 + t)$, то $\Delta = -t$; $b_0 = x^0$; $x^1 = x^0 - t$; $k = 1$;

5) найти следующую точку $x^{k+1} = x^k + 2^k \Delta$;

6) проверить условие убывания функции:

а) если $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ и $\Delta = t$, то $a_0 = x^k$;

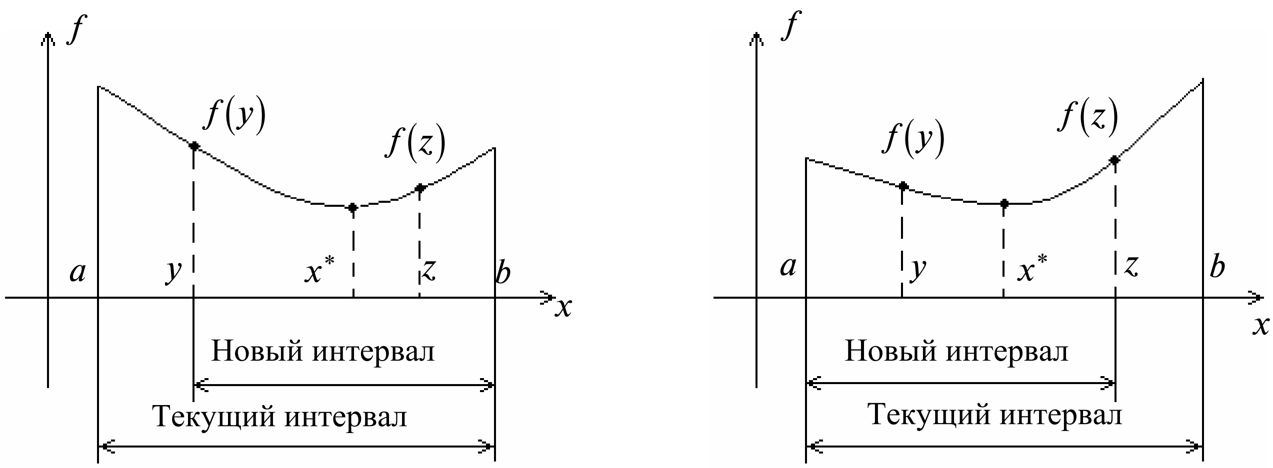
если $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ и $\Delta = -t$, то $b_0 = x^k$;

в обоих случаях положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 5;

б) если $f(x^{k+1}) \ge f(x^k)$, процедуру завершить. При $\Delta = t$ положить $b_0 = x^{k+1}$, а при $\Delta = -t$ положить $a_0 = x^{k+1}$. В результате имеем $[a_0, b_0]$ – искомый начальный интервал неопределенности.

3. Уменьшение интервала неопределенности, осуществляемое при использовании последовательной стратегии, производится на основании вычисления функции в двух точках текущего интервала. Свойство унимодальности позволяет определить, в каком из возможных подынтервалов точка минимума отсутствует.

Пусть в точках *y* и *z* интервала $[a, b]$ вычислены значения функции: $f(y)$ и $f(z)$. Если $f(y) > f(z)$, то $x^* \notin [a, y)$ и поэтому $x^* \in [y, b]$ (рис. 5.2, *а*). Если $f(y) < f(z)$, то $x^* \notin (z, b]$ и поэтому $x^* \in [a, z]$ (рис. 5.2, *б*). Иными словами, в качестве нового интервала берется «гарантирующий интервал», наверняка содержащий точку минимума. Если $f(y) = f(z)$, то в качестве нового интервала можно взять любой из изображенных на рис. 5.2.



а *б*

Рис. 5.2

Для оценки эффективности алгоритмов уменьшения интервала неопределенности при заданном числе N вычислений функции введем критерий.

Определение 5.2. *Характеристикой* $R(N)$ *относительного уменьшения начального интервала неопределенности* называется отношение длины интервала, получаемого в результате N вычислений функции, к длине начального интервала неопределенности: $R(N) = \dfrac{|L_N|}{|L_0|}$.

Пример 5.1. Найти начальный интервал неопределенности для поиска минимума функции $f(x) = (x-5)^2$.

□ Воспользуемся алгоритмом Свенна.

1. Зададим $x^0 = 1$ и $t = 1$. Положим $k = 0$.

2^0. Вычислим значения функции в точках $x^0 - t = 0$; $x^0 = 1$; $x^0 + t = 2$:

$$f(0) = 25,\ \ f(1) = 16,\ \ f(2) = 9.$$

3^0. Условия окончания не выполняются.

4^0. Так как $f(0) > f(1) > f(2)$, то $\Delta = 1$, $a_0 = 1$, $x^1 = x^0 + t = 2$, $k = 1$.

5^0. Найдем следующую точку $x^2 = x^1 + 2\Delta = 2 + 2 = 4$.

6^0. Так как $f\left(x^2\right) = 1 < f\left(x^1\right)$ и $\Delta = 1$, то $a_0 = x^1 = 2$. Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 5.

5^1. Найдем следующую точку $x^3 = x^2 + 4\Delta = 4 + 4 = 8$.

6^1. Так как $f\left(x^3\right) = 9 > f\left(x^2\right) = 1$ и $\Delta = t = 1$, то поиск завершен и правая граница $b_0 = x^3 = 8$. Поэтому начальный интервал неопределенности имеет вид $[a_0, b_0] = [2, 8]$. ■

5.1.2. Метод равномерного поиска

Постановка задачи

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

Стратегия поиска

Метод относится к пассивным стратегиям. Задаются начальный интервал неопределенности $L_0 = [a_0, b_0]$ и количество вычислений функции N. Вычисления производятся в N равноотстоящих друг от друга точках (при этом интервал L_0 делится на $N+1$ равных интервалов). Путем сравнения величин $f(x_i)$, $i = 1, \ldots, N$, находится точка x_k, в которой значение функции наименьшее. Искомая точка минимума x^* считается заключенной в интервале $[x_{k-1}, x_{k+1}]$ (рис. 5.3).

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальный интервал неопределенности $L_0 = [a_0, b_0]$, N – количество вычислений функции.

Шаг 2. Вычислить точки $x_i = a_0 + i\,\dfrac{(b_0 - a_0)}{N+1}$, $i = 1, \dots, N$, равноотстоящие друг от друга.

Шаг 3. Вычислить значения функции в N найденных точках: $f(x_i)$, $i = 1, \dots, N$.

Шаг 4. Среди точек x_i, $i = 1, \dots, N$, найти такую, в которой функция принимает наименьшее значение: $f(x_k) = \min\limits_{1 \le i \le N} f(x_i)$.

Шаг 5. Точка минимума x^* принадлежит интервалу: $x^* \in [x_{k-1}, x_{k+1}] = L_N$, на котором в качестве приближенного решения может быть выбрана точка $x^* \cong x_k$.

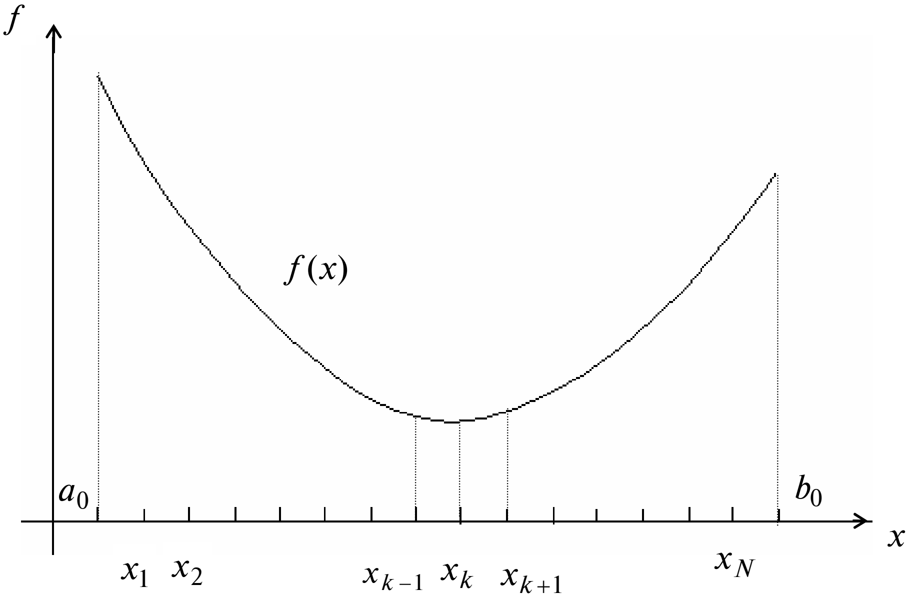


Рис. 5.3

Сходимость

Для метода равномерного поиска характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности находится по формуле $R(N) = \dfrac{2}{N+1}$, где N – количество вычислений функции.

З а м е ч а н и я 5.3.

1. Если задана величина $R(N)$, то требуемое для достижения желаемой точности количество вычислений функции определяется как наименьшее целое число, удовлетворяющее условию $N \ge \dfrac{2}{R(N)} - 1$.

2. Разбиение интервала $\left[a_0, b_0\right]$ на $N+1$ равных частей используется также в *методе перебора*. Для решения задачи этим методом следует:

а) вычислить точки $x_i = a_0 + i\dfrac{(b_0 - a_0)}{N+1}$, $i = 0,\dots,N+1$, равноотстоящие друг от друга;

б) вычислить значения функции в найденных точках: $f(x_i)$, $i = 0,\dots,N+1$;

в) среди точек x_i, $i = 0,\dots,N+1$, найти такую, в которой функция принимает наименьшее значение: $f(x_k) = \min\limits_{0 \le i \le N+1} f(x_i)$. Погрешность нахождения точки минимума методом перебора не превосходит $\dfrac{(b_0 - a_0)}{N+1}$.

Пример 5.2. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 - 12x$ методом равномерного поиска.

☐ Воспользуемся алгоритмом равномерного поиска.

1. Найдем начальный интервал неопределенности методом Свенна (см. п. 2 замечаний 5.2):

а) зададим начальную точку $x^0 = 5$, шаг $t = 5$. Положим $k = 0$;

б) вычислим значение функции в трех точках: $x^0 - t = 0;\ x^0 = 5;\ x^0 + t = 10$:

$$f(x^0 - t) = 0; \qquad f(x^0) = -10; \qquad f(x^0 + t) = 80;$$

в) так как $f(x^0 - t) > f(x^0) < f(x^0 + t)$, то начальный интервал неопределенности найден: $L_0 = \left[0, 10\right]$. Зададим $N = 9$ так, чтобы L_0 содержал $N + 1 = 10$ равных подынтервалов.

2. Определим точки вычисления функции: $x_i = 0 + i\dfrac{(10-0)}{10} = i$, $i = 1,\dots,9$.

3. Вычислим значения функции в девяти точках: $f(1) = -10$, $f(2) = -16$, $f(3) = -18$, $f(4) = -16$, $f(5) = -10$, $f(6) = 0$, $f(7) = 14$, $f(8) = 32$, $f(9) = 54$.

4. В точке $x_3 = 3$ функция принимает наименьшее значение: $f(x_3) = -18$.

5. Искомая точка минимума после девяти вычислений принадлежит интервалу: $x^* \in \left[2, 4\right] = L_9$, в котором выбирается точка $x^* \cong x_3 = 3$.

Заметим, что характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности $R(N) = \dfrac{|L_9|}{|L_0|} = \dfrac{4-2}{10-0} = 0{,}2 = \dfrac{2}{9+1}$. ■

5.1.3. Метод деления интервала пополам

Постановка задачи

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

Стратегия поиска

Метод относится к последовательным стратегиям и позволяет исключить из дальнейшего рассмотрения на каждой итерации в точности половину текущего интервала неопределенности. Задается начальный интервал неопределенности, а алгоритм уменьшения интервала, являясь, как и в общем случае, «гарантирующим» (см. рис. 5.2), основан на анализе величин функции в трех точках, равномерно распределенных на текущем интервале (делящих его на четыре равные части). Условия окончания процесса поиска стандартные: поиск заканчивается, когда длина текущего интервала неопределенности оказывается меньше установленной величины.

Алгоритм

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

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить среднюю точку $x_k^c = \dfrac{a_k + b_k}{2}$, $|L_{2k}| = b_k - a_k$, $f(x_k^c)$.

Шаг 4. Вычислить точки $y_k = a_k + \dfrac{|L_{2k}|}{4}$, $z_k = b_k - \dfrac{|L_{2k}|}{4}$ и значения $f(y_k)$, $f(z_k)$. Заметим, что точки y_k, x_k^c, z_k делят интервал $[a_k, b_k]$ на четыре равные части.

Шаг 5. Сравнить значения $f(y_k)$ и $f(x_k^c)$:

а) если $f(y_k) < f(x_k^c)$, исключить интервал $(x_k^c, b_k]$, положив $b_{k+1} = x_k^c$, $a_{k+1} = a_k$. Средней точкой нового интервала становится точка y_k: $x_{k+1}^c = y_k$ (рис. 5.4,*а*). Перейти к шагу 7;

б) если $f(y_k) \geq f(x_k^c)$, перейти к шагу 6.

Шаг 6. Сравнить $f(z_k)$ с $f(x_k^c)$:

а) если $f(z_k) < f(x_k^c)$, исключить интервал $[a_k, x_k^c)$, положив $a_{k+1} = x_k^c$, $b_{k+1} = b_k$. Средней точкой нового интервала становится точка z_k: $x_{k+1}^c = z_k$ (рис. 5.4,*б*). Перейти к шагу 7;

б) если $f(z_k) \geq f(x_k^c)$, исключить интервалы $[a_k, y_k)$, $(z_k, b_k]$, положив $a_{k+1} = y_k$, $b_{k+1} = z_k$. Средней точкой нового интервала останется x_k^c: $x_{k+1}^c = x_k^c$ (рис. 5.4, *в*).

Шаг 7. Вычислить $|L_{2(k+1)}| = |b_{k+1} - a_{k+1}|$ и проверить условие окончания:

а) если $|L_{2(k+1)}| \leq l$, 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: $x^* \cong x_{k+1}^c$;

б) если $|L_{2(k+1)}| > l$, то положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 4.

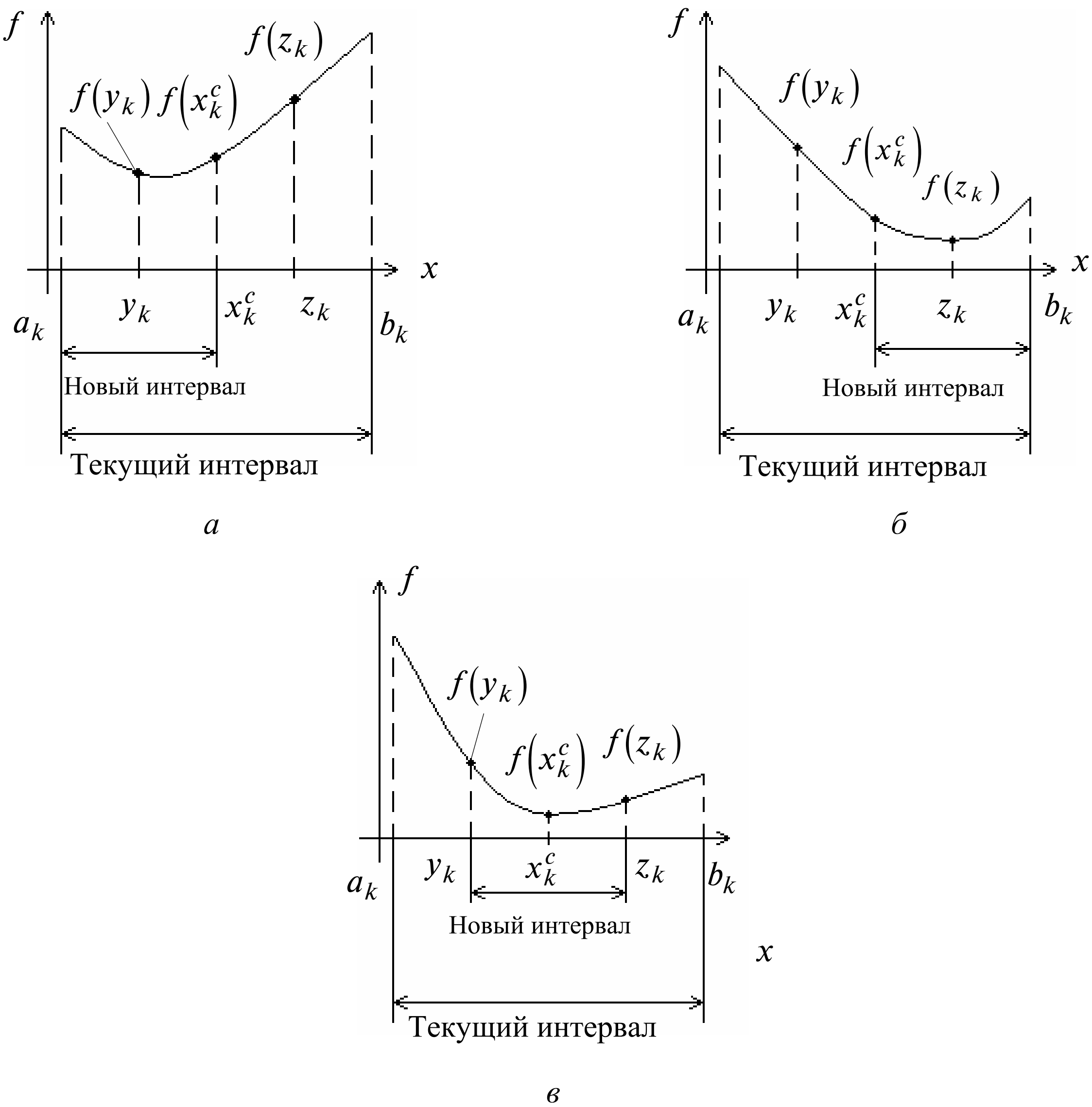


Рис. 5.4

Сходимость

Для метода деления интервала пополам характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности находится по формуле $R(N) = \dfrac{1}{2^{\frac{N}{2}}}$, где N – количество вычислений функции.

З а м е ч а н и я 5.4.

1. Средняя точка последовательно получаемых интервалов всегда совпадает с одной из трех пробных точек, найденных на предыдущей итерации. Следовательно, на каждой итерации требуются два новых вычисления функции.

2. Если задана величина $R(N)$, то требуемое для достижения желаемой точности количество вычислений функции находится как наименьшее целое, удовлетворяющее условию $N \geq \dfrac{2\ln R(N)}{\ln 0{,}5}$.

3. Текущие интервалы имеют четные номера $L_0, L_2, L_4, \ldots$, где индекс указывает на сделанное количество вычислений функции.

Пример 5.3. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 - 12x$ методом деления интервала пополам.

□ 1. Зададим начальный интервал неопределенности $L_0 = [0,10]$ (см. п. 1 примера 5.2). Пусть $l = 1$.

2. Положим $k = 0$.

3^0. Вычислим $x_0^c = \dfrac{0+10}{2} = 5$, $|L_0| = |10-0| = 10$, $f\left(x_0^c\right) = -10$.

4^0. Вычислим $y_0 = a_0 + \dfrac{|L_0|}{4} = 0 + \dfrac{10}{4} = 2{,}5$; $z_0 = b_0 - \dfrac{|L_0|}{4} = 10 - \dfrac{10}{4} = 7{,}5$;

$$f(y_0) = -17{,}5; \quad f(z_0) = 22{,}5.$$

5^0. Сравним $f(y_0)$ и $f\left(x_0^c\right)$. Так как $f(y_0) = -17{,}5 < f\left(x_0^c\right) = -10$, то положим $a_1 = a_0 = 0$, $b_1 = x_0^c = 5$, $x_1^c = y_0 = 2{,}5$.

7^0. Получим $L_2 = [0,5]$, $|L_2| = 5 > l = 1$, $k = 1$. Перейдем к шагу 4.

4^1. Вычислим $y_1 = a_1 + \dfrac{|L_2|}{4} = 0 + \dfrac{5}{4} = 1{,}25$; $z_1 = b_1 - \dfrac{|L_2|}{4} = 5 - \dfrac{5}{4} = 3{,}75$; $f(y_1) = -11{,}875$; $f(z_1) = -16{,}875$.

5^1. Сравним $f(y_1)$ и $f\left(x_1^c\right) = f(y_0) = -17{,}5$.

Так как $f(y_1) = -11{,}875 > f\left(x_1^c\right) = -17{,}5$, то перейдем к шагу 6.

6^1. Сравним $f(z_1)$ и $f\left(x_1^c\right)$. Так как $f(z_1) = -16{,}875 > f\left(x_1^c\right) = -17{,}5$, то положим: $a_2 = y_1 = 1{,}25$; $b_2 = z_1 = 3{,}75$; $x_2^c = x_1^c = 2{,}5$.

7^1. Получим $L_4 = [1{,}25; 3{,}75]$, $|L_4| = 3{,}75 - 1{,}25 = 2{,}5 > l = 1$. Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 4.

4^2. Вычислим

$$y_2 = a_2 + \frac{|L_4|}{4} = 1{,}25 + \frac{2{,}5}{4} = 1{,}875; \quad z_2 = b_2 - \frac{|L_4|}{4} = 3{,}75 - \frac{2{,}5}{4} = 3{,}125;$$

$$f(y_2) \cong -15{,}47; \quad f(z_2) \cong -17{,}97.$$

5^2. Сравним $f(y_2)$ с $f\left(x_2^c\right) = f\left(x_1^c\right) = -17{,}5$.

Так как $f(y_2) = -15{,}47 > f\left(x_2^c\right) = -17{,}5$, то перейдем к шагу 6.

6^2. Сравним $f(z_2)$ с $f\left(x_2^c\right) = -17{,}5$. Так как $f(z_2) = -17{,}97 < f\left(x_2^c\right) = -17{,}5$, то положим $a_3 = x_2^c = 2{,}5$; $b_3 = b_2 = 3{,}75$; $x_3^c = z_2 = 3{,}125$.

7^2. Получим $L_6 = [2{,}5; 3{,}75]$, $|L_6| = 3{,}75 - 2{,}5 = 1{,}25 > l = 1$. Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 4.

4^3. Вычислим

$$y_3 = a_3 + \frac{|L_6|}{4} = 2{,}5 + \frac{1{,}25}{4} = 2{,}81; \quad z_3 = b_3 - \frac{|L_6|}{4} = 3{,}75 - \frac{1{,}25}{4} = 3{,}43;$$

$$f(y_3) = -17{,}93; \quad f(z_3) = -17{,}62.$$

5^3. Сравним $f(y_3)$ с $f\left(x_3^c\right) = f(z_2) = -17{,}97$.

Так как $f(y_3) = -17{,}93 > f\left(x_3^c\right) = -17{,}97$, то перейдем к шагу 6.

6^3. Сравним $f(z_3)$ с $f\left(x_3^c\right)$. Так как $f(z_3) = -17{,}63 > f\left(x_3^c\right) = -17{,}97$, то положим $a_4 = y_3 = 2{,}81$; $b_4 = z_3 = 3{,}43$; $x_4^c = x_3^c = 3{,}125$.

7^3. Получим $L_8 = [2{,}81; 3{,}43]$, $|L_8| = 3{,}43 - 2{,}81 = 0{,}62 < l = 1$; $x^* \in L_8$, $N = 8$. В качестве решения можно взять среднюю точку последнего интервала $x^* \cong x_4^c = 3{,}125$.

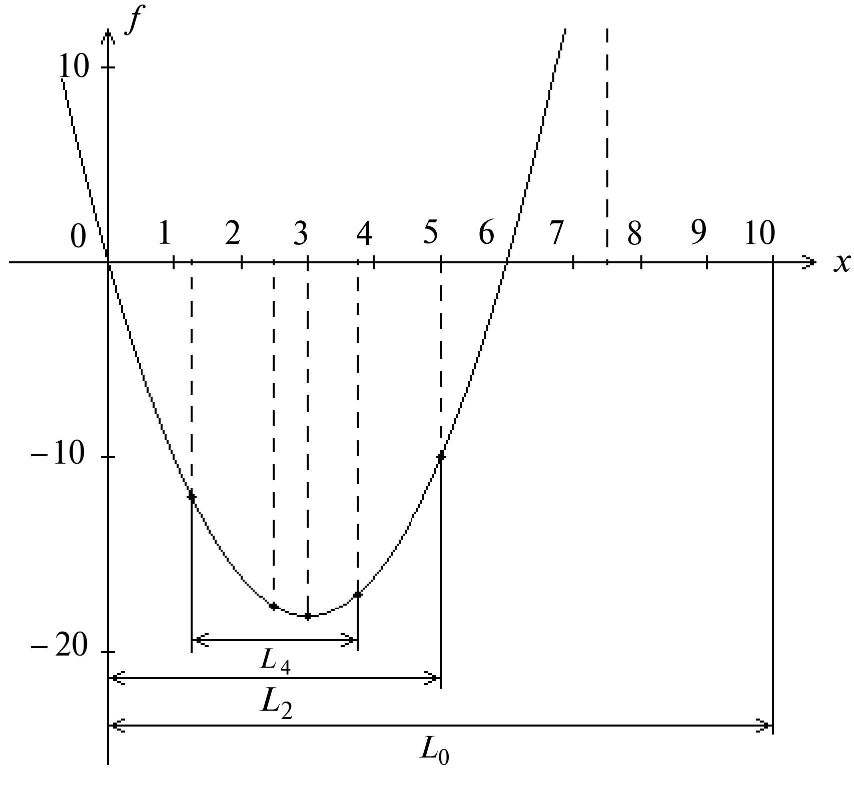


Рис. 5.5

Первые итерации поиска изображены на рис. 5.5. ■

5.1.4. Метод дихотомии

Постановка задачи

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

Стратегия поиска

Метод относится к последовательным стратегиям. Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 5.2). 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. 5.6, *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. 5.6, *б*).

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

а) если $\left|L_{2(k+1)}\right| \le l$, 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 $\left|L_{2(k+1)}\right| > l$, положить $k = k+1$ и перейти к шагу 3.

Рис. 5.6

Сходимость

Для метода дихотомии характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности находится по формуле $R(N) = \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}}$, где N – количество вычислений функции.

З а м е ч а н и я 5.5.

1. Текущие интервалы неопределенности $L_0, L_2, L_4, \ldots$ имеют четные номера, указывающие на количество сделанных вычислений функции, как и в методе деления интервала пополам.

2. Эффективность методов дихотомии и деления интервала пополам при малых ε можно считать одинаковой.

Пример 5.4. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 - 12x$ методом дихотомии.

□ 1. Зададим начальный интервал неопределенности: $L_0 = [0,10]$ (см. п. 1 примера 5.2). Положим $\varepsilon = 0{,}2$; $l = 1$.

2. Положим $k = 0$.

3^0. Вычислим

$$y_0 = \frac{a_0 + b_0 - \varepsilon}{2} = \frac{0 + 10 - 0{,}2}{2} = 4{,}9; \qquad z_0 = \frac{a_0 + b_0 + \varepsilon}{2} = \frac{0 + 10 + 0{,}2}{2} = 5{,}1;$$

$$f(y_0) = -10{,}78; \qquad f(z_0) = -9{,}18.$$

4^0. Так как $f(y_0) < f(z_0)$, то $a_1 = a_0 = 0$, $b_1 = z_0 = 5{,}1$ (рис. 5.6, *а*).

5^0. Получим $L_2 = [0; 5{,}1]$, $|L_2| = 5{,}1 > l = 1$. Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 3.

3^1. Вычислим

$$y_1 = \frac{a_1 + b_1 - \varepsilon}{2} = \frac{0 + 5{,}1 - 0{,}2}{2} = 2{,}45; \qquad z_1 = \frac{a_1 + b_1 + \varepsilon}{2} = \frac{0 + 5{,}1 + 0{,}2}{2} = 2{,}65;$$

$$f(y_1) = -17{,}395; \qquad f(z_1) = -17{,}755.$$

4^1. Так как $f(y_1) > f(z_1)$, то $a_2 = y_1 = 2{,}45$; $b_2 = b_1 = 5{,}1$ (рис. 5.6, *б*).

5^1. Получим $L_4 = [2{,}45; 5{,}1]$, $|L_4| = 5{,}1 - 2{,}45 = 2{,}65 > l = 1$. Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 3.

3^2. Вычислим

$$y_2 = \frac{a_2 + b_2 - \varepsilon}{2} = \frac{2{,}45 + 5{,}1 - 0{,}2}{2} = 3{,}675; \quad z_2 = \frac{a_2 + b_2 + \varepsilon}{2} = \frac{2{,}45 + 5{,}1 + 0{,}2}{2} = 3{,}875;$$

$$f(y_2) = -17{,}089; \quad f(z_2) = -16{,}469.$$

4^2. Так как $f(y_2) < f(z_2)$, то $a_3 = a_2 = 2{,}45$; $b_3 = z_2 = 3{,}875$ (рис. 5.6, *а*).

5^2. Получим $L_6 = [2{,}45; 3{,}875]$, $|L_6| = 3{,}875 - 2{,}45 = 1{,}425 > l = 1$. Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 3.

3^3. Вычислим

$$y_3 = \frac{a_3 + b_3 - \varepsilon}{2} = \frac{2{,}45 + 3{,}875 - 0{,}2}{2} = 3{,}06\,; \quad z_3 = \frac{a_3 + b_3 + \varepsilon}{2} = \frac{2{,}45 + 3{,}875 + 0{,}2}{2} = 3{,}26\,;$$

$$f(y_3) = -17{,}99\,; \quad f(z_3) = -17{,}86\,.$$

4^3. Так как $f(y_3) < f(z_3)$, то $a_4 = a_3 = 2{,}45$; $b_4 = z_3 = 3{,}26$ (рис. 5.6, *а*).

5^3. Получим $L_8 = [2{,}45; 3{,}26]$, $|L_8| = 3{,}26 - 2{,}45 = 0{,}81 < l = 1$;

$x^* \in [2{,}45; 3{,}26]$, $N = 8$, $x^* \cong \dfrac{2{,}45 + 3{,}26}{2} = 2{,}855$.

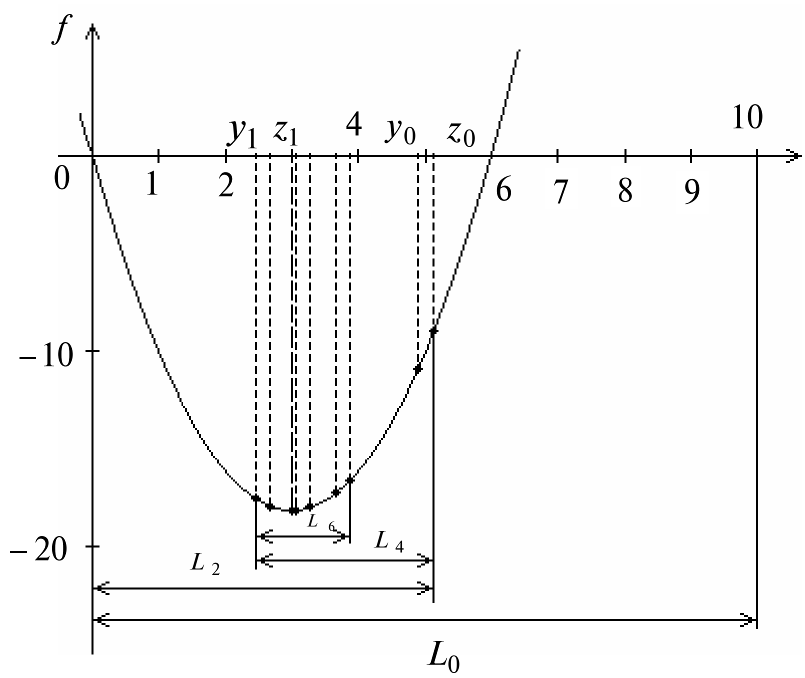


Рис. 5.7

Первые итерации поиска изображены на рис. 5.7. ■

5.1.5. Метод золотого сечения

Постановка задачи

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

Для построения конкретного метода одномерной минимизации, работающего по принципу последовательного сокращения интервала неопределенности, следует задать правило выбора на каждом шаге двух внутренних точек. Конечно, желательно, чтобы одна из них всегда использовалась в качестве внутренней и для следующего интервала. Тогда число вычислений функции сократится вдвое и одна итерация потребует расчета только одного нового значения функции. В методе золотого сечения в качестве двух внутренних точек выбираются точки золотого сечения.

Определение 5.3. 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. 5.8).

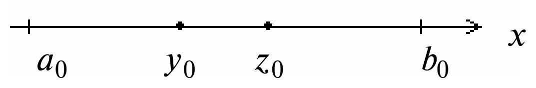


Рис. 5.8

Стратегия поиска

Метод относится к последовательным стратегиям. Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм уменьшения интервала опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 5.2). 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. 5.9, *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. 5.9, *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.

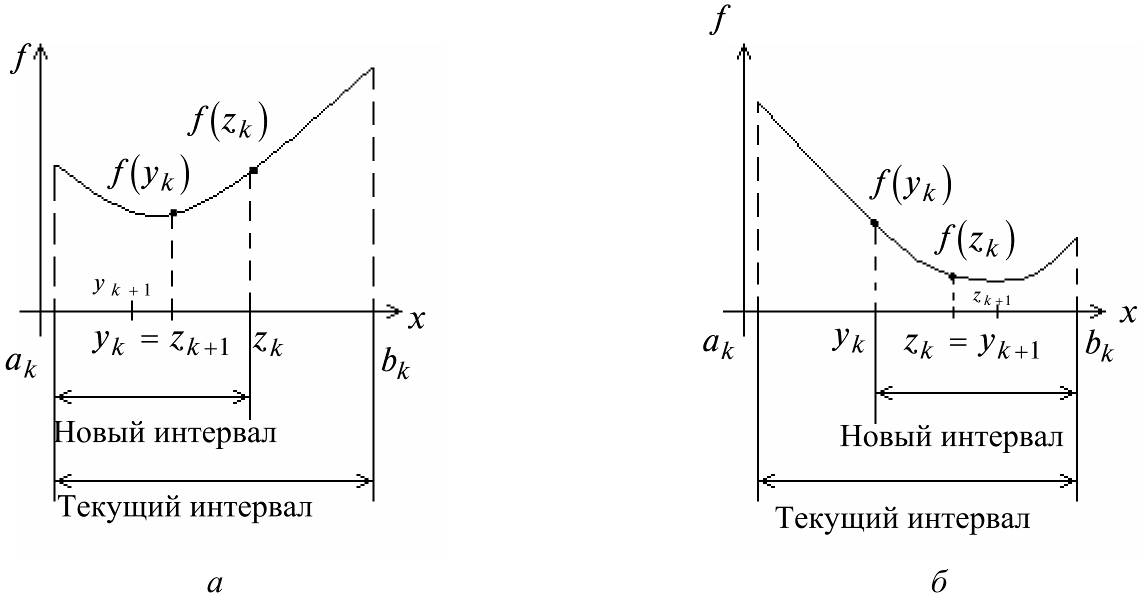


Рис. 5.9

Сходимость

Для метода золотого сечения характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности находится по формуле $R(N) = (0{,}618)^{N-1}$, где N – количество вычислений функции.

З а м е ч а н и я 5.6.

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:

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

3. Если задана величина $R(N)$, то требуемое для достижения желаемой точности количество вычислений функции находится как наименьшее целое число, удовлетворяющее условию $N \ge 1 + \frac{\ln R(N)}{\ln 0{,}618}$.

Пример 5.5. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 - 12x$ методом золотого сечения.

□ 1. Зададим начальный интервал неопределенности: $L_0 = [0,10]$ (см. п. 1 примера 5.2). Положим $l = 1$.

2. Положим $k = 0$.

3^0. Вычислим

$$y_0 = a_0 + 0{,}382\,(b_0 - a_0) = 0 + 0{,}382 \cdot 10 = 3{,}82;\ z_0 = a_0 + b_0 - y_0 = 0 + 10 - 3{,}82 = 6{,}18.$$

4^0. Вычислим $f(y_0) = -16{,}65$; $f(z_0) = 2{,}22$.

5^0. Сравним $f(y_0)$ и $f(z_0)$. Так как $f(y_0) < f(z_0)$, то $a_1 = a_0 = 0$, $b_1 = z_0 = 6{,}18$ (рис. 5.9, *а*); $y_1 = a_1 + b_1 - y_0 = 0 + 6{,}18 - 3{,}82 = 2{,}36$; $z_1 = y_0 = 3{,}82$.

6^0. Получим $L_2 = [0; 6{,}18]$, $|L_2| = 6{,}18 > l = 1$. Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 4.

4^1. Вычислим $f(y_1) = -17{,}18$ (новое вычисление), $f(z_1) = f(y_0) = -16{,}65$ (уже было вычислено на шаге 4^0).

5^1. Сравним $f(y_1)$ и $f(z_1)$. Так как $f(y_1) < f(z_1)$, то $a_2 = a_1 = 0$, $b_2 = z_1 = 3{,}82$; $y_2 = a_2 + b_2 - y_1 = 0 + 3{,}82 - 2{,}36 = 1{,}46$; $z_2 = y_1 = 2{,}36$.

6^1. Получим $L_3 = [0; 3{,}82]$, $|L_3| = 3{,}82 > l = 1$. Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 4.

4^2. Вычислим $f(y_2) = -13{,}25$ (новое вычисление), $f(z_2) = f(y_1) = -17{,}18$ (уже было вычислено на шаге 4^1).

5^2. Сравним $f(y_2)$ и $f(z_2)$. Так как $f(y_2) > f(z_2)$, то $a_3 = y_2 = 1{,}46$; $b_3 = b_2 = 3{,}82$; $y_3 = z_2 = 2{,}36$; $z_3 = a_3 + b_3 - z_2 = 1{,}46 + 3{,}82 - 2{,}362 = 2{,}92$.

6^2. Получим $L_4 = [1{,}46; 3{,}82]$, $|L_4| = 3{,}82 - 1{,}46 = 2{,}36 > l = 1$. Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 4.

4^3. Вычислим $f(y_3) = f(z_2) = -17{,}18$ (уже было вычислено на шаге 4^2), $f(z_3) = -17{,}99$.

5^3. Сравним $f(y_3)$ и $f(z_3)$. Так как $f(y_3) > f(z_3)$, то $a_4 = y_3 = 2{,}36$; $b_4 = b_3 = 3{,}82$; $y_4 = z_3 = 2{,}92$; $z_4 = a_4 + b_4 - z_3 = 2{,}36 + 3{,}82 - 2{,}92 = 3{,}26$.

6^3. Получим $L_5 = [2{,}36; 3{,}82]$, $|L_5| = 3{,}82 - 2{,}36 = 1{,}46 > l = 1$. Положим $k = 4$ и перейдем к шагу 4.

4^4. Вычислим $f(y_4) = f(z_3) = -17{,}99$ (было известно), $f(z_4) = -17{,}86$.

5^4. Сравним $f(y_4)$ и $f(z_4)$. Так как $f(y_4) < f(z_4)$, то $a_5 = a_4 = 2{,}36$; $b_5 = z_4 = 3{,}26$; $y_5 = a_5 + b_5 - y_4 = 2{,}36 + 3{,}26 - 2{,}92 = 2{,}7$; $z_5 = y_4 = 2{,}92$.

6^4. Получим $L_6 = [2{,}36; 3{,}26]$, $|L_6| = 3{,}26 - 2{,}36 = 0{,}9 < l = 1$, $x^* \in L_6$, $N = 6$,

$$x^* \cong \frac{3{,}26 + 2{,}36}{2} = 2{,}81.$$

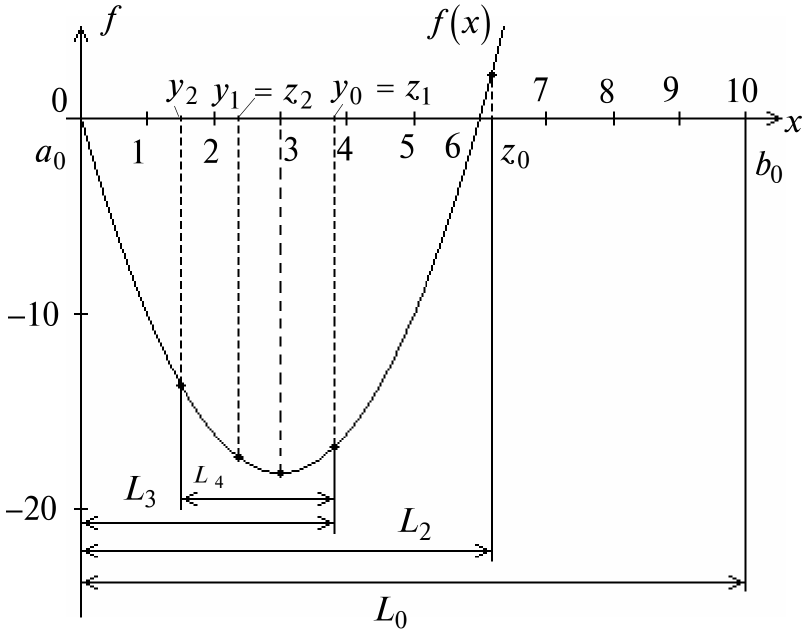


Рис. 5.10

Первые итерации поиска изображены на рис. 5.10. ■

5.1.6. Метод Фибоначчи

Постановка задачи

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

Для построения эффективного метода одномерной минимизации, работающего по принципу последовательного сокращения интервала неопределенности, следует задать правило выбора на каждом шаге двух внутренних точек. Конечно, желательно, чтобы одна из них всегда использовалась в качестве внутренней и для следующего интервала. Тогда количество вычислений функции сократится вдвое и одна итерация потребует расчета только одного нового значения функции. В методе Фибоначчи реализована стратегия, обеспечивающая максимальное гарантированное сокращение интервала неопределенности при заданном количестве вычислений функции и претендующая на оптимальность. Эта стратегия опирается на числа Фибоначчи.

Определение 5.4. *Числа Фибоначчи* определяются по формуле

$$F_0 = F_1 = 1, \quad F_k = F_{k-1} + F_{k-2}, \quad k = 2,3,4,\dots .$$

Последовательность чисел Фибоначчи имеет вид 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233,... .

Стратегия поиска

Метод относится к последовательным стратегиям. Задается начальный интервал непределенности и количество N вычислений функции. Алгоритм уменьшения интервала опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 5.2). Точки вычисления функции находятся с использованием последовательности из $N+1$ чисел Фибоначчи. Как в методе золотого сечения, на первой итерации требуются два вычисления функции, а на каждой последующей – только по одному. Условия окончания процесса поиска стандартные: поиск заканчивается, когда длина текущего интервала неопределенности оказывается меньше установленной величины.

Алгоритм

Шаг 1. Задать начальный интервал неопределенности $L_0 = \left[a_0, b_0\right]$; $l > 0$ – допустимую длину конечного интервала, $\varepsilon > 0$ – константу различимости.

Шаг 2. Найти количество N вычислений функции как наименьшее целое число, при котором удовлетворяется условие $F_N \ge \dfrac{|L_0|}{l}$, и числа Фибоначчи $F_0, F_1, \ldots, F_N$.

Шаг 3. Положить $k = 0$.

Шаг 4. Вычислить $y_0 = a_0 + \dfrac{F_{N-2}}{F_N}(b_0 - a_0)$; $z_0 = a_0 + \dfrac{F_{N-1}}{F_N}(b_0 - a_0)$.

Шаг 5. Вычислить $f(y_k)$, $f(z_k)$.

Шаг 6. Сравнить $f(y_k)$ с $f(z_k)$:

а) если $f(y_k) \le f(z_k)$, положить

$$a_{k+1} = a_k; \quad b_{k+1} = z_k; \quad z_{k+1} = y_k; \quad y_{k+1} = a_{k+1} + \frac{F_{N-k-3}}{F_{N-k-1}}(b_{k+1} - a_{k+1})$$

и перейти к шагу 7;

б) если $f(y_k) > f(z_k)$, положить

$$a_{k+1} = y_k; \quad b_{k+1} = b_k; \quad y_{k+1} = z_k; \quad z_{k+1} = a_{k+1} + \frac{F_{N-k-2}}{F_{N-k-1}}(b_{k+1} - a_{k+1}).$$

Шаг 7. Проверить выполнение условия окончания и в случае необходимости сделать заключительное N-е вычисление функции для получения решения:

а) если $k \ne N-3$, положить $k = k+1$ и перейти к шагу 5;

б) если $k = N-3$, то всегда $y_{N-2} = z_{N-2} = \dfrac{(a_{N-2} + b_{N-2})}{2}$, т.е. отсутствует точка нового вычисления функции. Следует положить: $y_{N-1} = y_{N-2} = z_{N-2}$; $z_{N-1} = y_{N-1} + \varepsilon$. В точках y_{N-1} и z_{N-1} вычислить значения функции и найти границы конечного интервала неопределенности:

- если $f(y_{N-1}) \le f(z_{N-1})$, положить $a_{N-1} = a_{N-2}$, $b_{N-1} = z_{N-1}$;
- если $f(y_{N-1}) > f(z_{N-1})$, положить $a_{N-1} = y_{N-1}$, $b_{N-1} = b_{N-2}$.

Процесс поиска завершить. Точка минимума принадлежит интервалу: $x^* \in [a_{N-1}, b_{N-1}]$. В качестве приближенного решения можно взять любую точку последнего интервала неопределенности, например его середину $x^* \cong \frac{a_{N-1} + b_{N-1}}{2}$.

Сходимость

Для метода Фибоначчи характеристика относительного уменьшения начального интервала неопределенности находится по формуле $R(N) = \frac{1}{F_N}$, где N – количество вычислений функции.

З а м е ч а н и я 5.7.

1. При заданном количестве N вычислений функции метод Фибоначчи обеспечивает минимальную величину конечного интервала неопределенности по сравнению с методами, изложенными в разд. 5.1.2 – 5.1.5.

2. Нумерация интервалов неопределенности такая же, как в методе золотого сечения: $L_0, L_2, L_3, L_4, \ldots$ (см. п. 1 замечаний 5.6).

3. На k-й итерации длина интервала неопределенности сокращается по правилу $\frac{F_{N-k-1}}{F_{N-k}}$.

Пример 5.6. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 - 12x$ методом Фибоначчи.

☐ 1. Зададим начальный интервал неопределенности: $L_0 = [0,10]$ (см. п. 1 примера 5.2). Пусть $l = 1$, $\varepsilon = 0{,}01$; $F_6 = 13 > \frac{|L_0|}{l} = \frac{10}{1} = 10$, поэтому $N = 6$.

2. Найдем числа Фибоначчи: $F_0 = F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3,\ F_4 = 5, F_5 = 8, F_6 = 13$.

3. Положим $k = 0$.

4^0. Вычислим

$$y_0 = a_0 + \frac{F_4}{F_6}(b_0 - a_0) = 0 + \frac{5}{13} \cdot 10 = 3{,}846; \quad z_0 = a_0 + \frac{F_5}{F_6}(b_0 - a_0) = 0 + \frac{8}{13} \cdot 10 = 6{,}154.$$

5^0. Вычислим $f(y_0) = -16{,}57$; $f(z_0) = 1{,}893$.

6^0. Сравним $f(y_0)$ с $f(z_0)$. Так как $f(y_0) < f(z_0)$, то $a_1 = a_0 = 0$;

$$b_1 = z_0 = 6{,}154; \quad y_1 = a_1 + \frac{F_{6-3}}{F_{6-1}}(b_1 - a_1) = 0 + \frac{3}{8} \cdot 6{,}154 = 2{,}308; \quad z_1 = y_0 = 3{,}846.$$

7^0. Проверим условие окончания: $k = 0 \neq N - 3 = 6 - 3 = 3$; $L_2 = [0; 6{,}154]$. Положим $k = 1$ и перейдем к шагу 5.

5^1. Вычислим значение $f(y_1) = -17{,}04$; $f(z_1) = -16{,}57$ (уже было вычислено на шаге 5^0).

6^1. Сравним $f(y_1)$ и $f(z_1)$. Так как $f(y_1) < f(z_1)$, то $a_2 = a_1 = 0$; $b_2 = z_1 = 3{,}846$;

$$y_2 = a_2 + \frac{F_{6-4}}{F_{6-2}}(b_2 - a_2) = 0 + \frac{2}{5} \cdot 3{,}846 = 1{,}538; \quad z_2 = y_1 = 2{,}308.$$

7^1. Проверим условие окончания: $k = 1 \neq N - 3 = 3$; $L_3 = [0;\ 3{,}846]$. Положим $k = 2$ и перейдем к шагу 5.

5^2. Вычислим $f(y_2) = -13{,}73$; $f(z_2) = -17{,}04$ (было вычислено на шаге 5^1).

6^2. Сравним $f(y_2)$ с $f(z_2)$. Так как $f(y_2) > f(z_2)$, то

$$a_3 = y_2 = 1{,}538;\quad b_3 = b_2 = 3{,}846;\quad y_3 = z_2 = 2{,}308;$$

$$z_3 = a_3 + \frac{F_{6-4}}{F_{6-3}}(b_3 - a_3) = 1{,}538 + \frac{2}{3}\cdot(3{,}846 - 1{,}538) = 3{,}077.$$

7^2. Проверим условие окончания: $k = 2 \neq N = 3$, $L_4 = [1{,}538; 3{,}846]$. Положим $k = 3$ и перейдем к шагу 5.

5^3. Вычислим $f(y_3) = f(z_2) = -17{,}04$ (уже было известно); $f(z_3) = -17{,}9884$.

6^3. Сравним $f(y_3)$ и $f(z_3)$. Так как $f(y_3) > f(z_3)$, то

$$a_4 = y_3 = 2{,}308;\quad b_4 = b_3 = 3{,}846;\quad y_4 = z_3 = 3{,}077;$$

$$z_4 = a_4 + \frac{F_{6-5}}{F_{6-4}}(b_4 - a_4) = 2{,}308 + \frac{1}{2}\cdot(3{,}846 - 2{,}308) = 3{,}077.$$

7^3. Проверим условие окончания: $k = 3 = N - 3 = 3$; $L_5 = [2{,}308; 3{,}846]$. Положим $y_5 = y_4 = z_4 = 3{,}077$; $z_5 = y_5 + \varepsilon = 3{,}077 + 0{,}01 = 3{,}087$. Вычислим $f(y_5) = -17{,}9884$ (было вычислено на шаге 5^3); $f(z_5) = -17{,}985$. Так как $f(y_5) < f(z_5)$, то положим $a_5 = a_4 = 2{,}308$; $b_5 = z_5 = 3{,}087$. В результате найдены границы последнего интервала неопределенности, т.е. $x^* \in L_6 = [2{,}308; 3{,}087]$; $|L_6| = 3{,}087 - 2{,}308 = 0{,}78 < l = 1$. Заметим, что $\dfrac{|L_6|}{|L_0|} = 0{,}078 \cong \dfrac{1}{F_6} = \dfrac{1}{13} = 0{,}077$. В качестве приближенного решения задачи возьмем середину интервала L_6: $x^* \cong \dfrac{2{,}308 + 3{,}087}{2} = 2{,}697$. ■

5.1.7. Метод квадратичной интерполяции

Постановка задачи

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

Стратегия поиска

Метод квадратичной интерполяции, или метод Пауэлла (Powell), относится к последовательным стратегиям. 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. 5.11, *а*);

б) если $f(x_1) \le f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 - \Delta x$ (рис. 5.11, *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:

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

и величину функции $f(\bar{x})$(рис. 5.11).

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:

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

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.

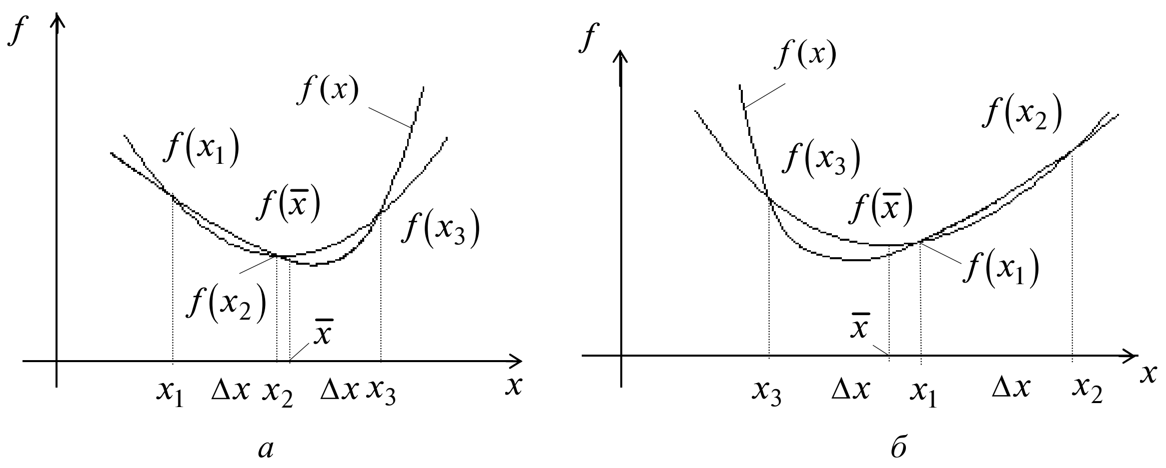


Рис. 5.11

З а м е ч а н и я 5.8.

1. Более точный метод, использующий кубическую интерполяцию и информацию о величине производной, изложен в разд. 6.7.

2. Шаги 1 – 4 алгоритма позволяют выяснить направление убывания функции, а в некоторых случаях определить интервал, на котором функция является унимодальной.

Пример 5.7. Найти минимум функции $f(x) = 2x^2 + \dfrac{16}{x}$ методом квадратичной интерполяции.

□ 1^0. Зададим начальную точку $x_1 = 1$, величину шага $\Delta x = 1$, $\varepsilon_1 = 0{,}003$; $\varepsilon_2 = 0{,}03$.

2^0. Вычислим $x_2 = x_1 + \Delta x = 2$.

3^0. Вычислим $f(x_1) = f_1 = 18$; $f(x_2) = f_2 = 16$.

4^0. Так как $f(x_1) > f(x_2)$, положим $x_3 = x_1 + 2\Delta x = 1 + 2 = 3$ (рис. 5.11, *а*).

5^0. Вычислим $f(x_3) = f_3 = 23{,}33$.

6^0. Найдем $F_{\min} = \min\{18; 16; 23{,}33\} = 16$; $x_{\min} = x_2 = 2$.

7^0. Вычислим точку минимума интерполяционного полинома:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\frac{(4-9)18 + (9-1)16 + (1-4)23{,}33}{(2-3)18 + (3-1)16 + (1-2)23{,}33} = 1{,}714; \quad f(\bar{x}) = 15{,}21.$$

8^0. Проверим условия окончания:

$\left|\dfrac{16 - 15{,}21}{15{,}21}\right| = 0{,}052 > \varepsilon_1 = 0{,}003$ (не выполняется), $\bar{x}$ – наилучшая точка, слева от нее точка $x_1 = 1$, а справа $x_2 = 2$. Обозначим их в естественном порядке $x_1 = 1$; $x_2 = \bar{x} = 1{,}714$; $x_3 = 2$. Этим точкам соответствуют следующие значения функции: $f_1 = 18$; $f_2 = 15{,}21$; $f_3 = 16$. Перейдем к шагу 6.

6^1. Найдем $F_{\min} = \min\{18; 15{,}21; 16\} = 15{,}21$; $x_{\min} = x_2 = 1{,}714$.

7^1. Вычислим точку минимума интерполяционного полинома:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\frac{\left(1{,}714^2 - 4\right)18 + (4-1)15{,}21 + \left(1 - 1{,}714^2\right)16}{(1{,}714 - 2)18 + (2-1)15{,}21 + (1 - 1{,}714)16} = 1{,}65; \quad f(\bar{x}) = 15{,}142.$$

8^1. Проверим условия окончания:

$$\left|\frac{15{,}21 - 15{,}142}{15{,}142}\right| = 0{,}0045 > 0{,}003 \text{ (не выполняется);}$$

$\bar{x}$ – наилучшая точка, слева от нее точка $x_1 = 1$, а справа $x_2 = 1{,}714$. Обозначим их в естественном порядке: $x_1 = 1$; $x_2 = 1{,}65$; $x_3 = 1{,}714$. Этим точкам соответствуют значения функции: $f_1 = 18$; $f_2 = 15{,}142$; $f_3 = 15{,}21$. Перейдем к шагу 6.

6^2. Найдем $F_{\min} = \min\{18;\ 15{,}142;\ 15{,}21\} = 15{,}142$; $x_{\min} = x_2 = 1{,}65$.

7^2. Вычислим точку минимума интерполяционного полинома:

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\frac{\left(1{,}65^2 - 1{,}714^2\right)18 + \left(1{,}714^2 - 1\right)15{,}142 + \left(1 - 1{,}65^2\right)15{,}21}{(1{,}65 - 1{,}714)18 + (1{,}714 - 1)15{,}142 + (1 - 1{,}65)15{,}21} = 1{,}6125; \ f(\bar{x}) = 15{,}123.$$

8^2. Проверим выполнение условий окончания:

$$\left|\frac{15{,}142-15{,}123}{15{,}123}\right| = 0{,}0013 < \varepsilon_1 = 0{,}003; \quad \left|\frac{1{,}65-1{,}6125}{1{,}6125}\right| = 0{,}023 < \varepsilon_1 = 0{,}03.$$

Поиск закончен. Полученное приближенное решение $x^* \cong \overline{x} = 1{,}6125$.

Найдем аналитически координату точки минимума с помощью необходимых условий безусловного экстремума: $\frac{d\,f(x)}{dx} = 4x - \frac{16}{x^2} = 0$. Отсюда $x^* = \sqrt[3]{4} = 1{,}5874$. В этой точке $f''(x^*) = 4 + \frac{32}{(x^*)^3} = 12 > 0$, т.е. достаточные условия безусловного минимума выполняются. ■

5.2. 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» [28]. Полученная информация используется при поиске по образцу при движении вдоль «оврагов» [5].

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. 5.12 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.