Лабораторная работа 2

Методы минимизации функций одной переменной, использующие информацию о производных целевой функции

Постановка задачи: Требуется найти безусловный минимум функции одной переменной $f(x)$ т.е. такую точку $x^* \in U$, что $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$. Значение точки минимума вычислить приближенно с заданной точностью ε.

В лабораторной работе №1 были рассмотрены прямые методы решения этой задачи. В данной работе рассматриваются методы, в которых используются значения производных целевой функции.

Пусть на предварительно выбранном интервале неопределенности $U_0 = [a;b]$ целевая функция $f(x)$ является выпуклой дифференцируемой функцией. Тогда для $f(x)$ необходимым и достаточным условием глобального минимума является условие

$$f'(x) = 0, \quad x \in U_0 = [a;b] \tag{1}$$

Метод средней точки

Стратегия поиска: Если определение производной $f'(x)$ в (1) не представляет затруднений, то в процедуре исключения отрезков методом дихотомии вычисление двух значений $f(x)$ вблизи середины очередного отрезка можно заменить вычислением одного значения $f'(x)$ в его средней точке $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$. Сравнивая $f'(\bar{x})$ с нулем, делим отрезок поиска точки x^* ровно вдвое, причем на каждой итерации вычисляется только одно значение $f'(x)$.

Алгоритм:

1. Выбрать начальный интервал неопределенности $U_0 = [a;b]$ и точность ε.
2. Положить $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$. Вычислить $f'(\bar{x})$.
3. Проверка на окончание поиска: если $|f'(\bar{x})| \le \varepsilon$, то положить $x^* = \bar{x}$, $f^* = f(\bar{x})$ и завершить поиск, иначе – перейти к шагу 4.
4. Сравнить $f'(\bar{x})$ с нулем. Если $f'(\bar{x}) > 0$, то продолжить поиск на отрезке $[a;\bar{x}]$, положив $b = \bar{x}$, иначе – перейти к отрезку $[\bar{x};b]$, положив $a = \bar{x}$. Перейти к шагу 2.

Метод хорд

Стратегия поиска: Пусть на концах отрезка $[a;b]$ производная $f'(x)$ имеет разные знаки, т.е. $f'(a) \cdot f'(b) < 0$. Тогда на интервале $(a;b)$ найдется точка, в которой $f'(x)$ обращается в нуль. В этом случае поиск точки минимума $f(x)$ на отрезке $[a;b]$ эквивалентен решению уравнения $f'(x) = 0$ на интервале $(a;b)$.

Сущность метода хорд приближенного решения уравнения $f'(x) = 0$ на отрезке $[a;b]$ при $f'(a) \cdot f'(b) < 0$ состоит в исключении отрезков путем определения точки $\tilde{x}$ - точки пересечения с осью Ox хорды графика функции $f'(x)$ на $[a;b]$.

Координата точки $\tilde{x}$ равна:

$$\tilde{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b) . \qquad (2)$$

Отрезок дальнейшего поиска точки x^* (отрезок $[a;\tilde{x}]$ или $[\tilde{x};b]$) выбирается в зависимости от знака $f'(\tilde{x})$ так же, как в методе средней точки. На каждой итерации, кроме первой, необходимо вычислять только одно новое значение $f'(x)$.

Алгоритм:

1. Выбрать начальный интервал неопределенности $U_0 = [a;b]$ и точность ε.
2. Найти $\tilde{x}$ по формуле (2). Вычислить $f'(\tilde{x})$. Перейти к шагу 3.
3. Проверка на окончание поиска: если $|f'(\tilde{x})| \le \varepsilon$, то положить $x^* = \bar{x}$, $f^* = f(\bar{x})$ и завершить поиск, иначе – перейти к шагу 4.
4. Переход к новому отрезку. Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то положить $b = \tilde{x}$, $f'(b) = f'(\tilde{x})$, иначе – положить $a = \tilde{x}$, $f'(a) = f'(\tilde{x})$. Перейти к шагу 2.

Метод Ньютона

Стратегия поиска: Для приближенного решения уравнения (1) используется метод касательных. Пусть $x_0 \in [a;b]$ - нулевое, или начальное приближение к искомой точке x^*. Линеаризуем функцию $F(x) = f'(x)$ в окрестности начальной точки, приближенно заменив дугу графика этой функции касательной в точке $(x_0, f'(x_0))$:

$$F(x) \approx F(x_0) + F'(x_0) \cdot (x - x_0) . \qquad (3)$$

Выберем в качестве следующего приближения к x^* точку x_1 пересечения касательной с осью абсцисс. Приравнивая к нулю правую часть в (3), получим первый элемент $x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$ итерационной последовательности $\{x_k\}$, $k = 1,2\ldots$.

В очередной точке x_k строится линейная аппроксимация функции $F(x)$ и точка, в которой эта аппроксимирующая функция обращается в нуль, используется в качестве следующего приближения x_{k+1}.

Уравнение касательной к графику $F(x)$ в точке $x = x_k$ имеет вид $y = F(x_k) + F'(x_k) \cdot (x - x_k)$, поэтому точка $x = x_{k+1}$, найденная из условия $y = 0$, определяется формулой $x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{F'(x_k)}$. Возвращаясь к обозначению $F(x) = f'(x)$, получим, что для решения уравнения $f'(x) = 0$ необходимо построить последовательность

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 0,1,\ldots \qquad (4)$$

где x_0 - точка, выбранная в качестве начального приближения. Вычисления по формуле (4) производятся до тех пор, пока не выполнится неравенство $|f'(x_k)| \le \varepsilon$, после чего полагают $x^* \approx x_k$, $f^* \approx f(x_k)$.

Возможные модификации метода Ньютона

1. Метод Ньютона-Рафсона:

При переходе к новой итерации новая точка x_{k+1} рассчитывается по формуле:

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad 0 < \tau_k \le 1.$$

В простейшем варианте метода $\tau_k = \tau = const$ (значение $\tau = 1$ соответствует исходному методу Ньютона). Оптимальный набор параметров τ_k может быть найден из решения задачи минимизации:

$$\varphi(\tau) = f\left(x_k - \tau \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \right) \to \min.$$

На практике для параметров τ_k обычно используется приближенное решение последней задачи:

$$\tau_k = \frac{(f'(x_k))^2}{(f'(x_k))^2 + (f'(\tilde{x}))^2}, \text{ где } \tilde{x} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}.$$

2. Метод Марквардта:

При переходе к новой итерации новая точка x_{k+1} рассчитывается по формуле:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k) + \mu_k}, \quad \mu_k > 0$$

Значение параметра μ_0 выбирается как минимум на порядок больше значения $f''(x_0)$.

При переходе к новой итерации новое значение μ_{k+1} полагают равным $\mu_{k+1} = \mu_k / 2$, если $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, либо $\mu_{k+1} = 2\mu_k$ в противном случае.

Метод перебора (минимизации многомодальных функций)

Стратегия поиска: Применение этого метода строго обосновано лишь для унимодальной на $[a;b]$ функции $f(x)$. Однако, если вместо унимодальности потребовать, чтобы функция $f(x)$ удовлетворяла на $[a;b]$ условию Липшица

$$|f(x_1) - f(x_2)| \le L|x_1 - x_2|, \text{ для всех } x_1, x_2 \in [a;b], \tag{5}$$

то можно гарантировать определение минимального значения f^* методом перебора с любой заданной точностью. Сформулируем утверждение более строго.

Пусть функция $f(x)$ удовлетворяет на отрезке $[a;b]$ условию Липшица (5) с константой L и приближенные значения $x^* \approx x_m$, $f^* \approx f(x_m)$ найдены методом перебора с разбиением отрезка $[a;b]$ на n частей. Тогда для погрешности δ_n определения минимального значения f^* справедлива оценка

$$\delta_n = f(x_m) - f^* \le L \cdot \frac{b-a}{2n}. \tag{6}$$

Замечание. Если функция $f(x)$ многомодальна, то погрешность определения ее точки минимума может быть значительной, несмотря на то, что сам минимум f^* найден достаточно точно.

Однако во многих случаях практический интерес представляют те значения аргумента x (возможно, далекие от x^*), при которых целевая функция принимает значения, достаточно близкие к минимальному. Это позволяет использовать метод перебора для многомодальных функций.

Метод ломаных (минимизации многомодальных функций)

Ознакомиться со стратегией и алгоритмом метода ломаных по главе 3 пособия на электронном носителе или по дополнительной литературе.

Задания

1. Написать в среде MATLAB функции, реализующие метод средней точки, метод хорд и метод Ньютона.

2. Выбрать для выполнения работы тестовую функцию, номер которой соответствует номеру Вашего компьютера. Например, для компьютера №3 это будет функция 3), для компьютера №13 – функция 4): 13-9=4; для компьютера №23 это будет функция 5): 23-9$\times$2=5.

1) $f(x) = x^3 - 3\sin x \to \min, \quad x \in [0,\ 1]$.

2) $f(x) = x^4 + x^2 + x + 1 \to \min, \quad x \in [-1,\ 0]$.

3) $f(x) = e^x + \dfrac{1}{x} \to \min, \quad x \in [0{,}5,\ 1{,}5]$.

4) $f(x) = x^2 - 2x + e^{-x} \to \min, \quad x \in [-1, 1{,}5]$.

5) $f(x) = x\sin x + 2\cos x \to \min, \quad x \in [-6, -4]$.

6) $f(x) = x + \dfrac{1}{x^2} \to \min, \quad x \in [1, 2]$.

7) $f(x) = 10x\ln x - \dfrac{x^2}{2} \to \min, \quad x \in [0{,}1, 1]$.

8) $f(x) = e^x - \dfrac{1}{3}x^3 + 2x \to \min, \quad x \in [-2{,}5,\ -1]$.

9) $f(x) = x^2 - 2x - 2\cos x \to \min, \quad x \in [-0{,}5,\ 1]$.

3. Для выбранной функции и для каждого рассмотренного выше метода изучить зависимость скорости работы (числа вычислений функции N) от заданного значения точности ε. Провести сравнение методов друг с другом. *Объяснить полученные результаты.*

4. Определить, сколько вычислений функции потребуется каждому методу для того, чтобы разность между численным решением и аналитическим решением, найденным в задании для численной реализации гл. 2, была меньше $\varepsilon = 10^{-4}$.

5. Сравнить полученные результаты с результатами выполнения задания для численной реализации гл. 2. *Сформулировать достоинства и недостатки прямых методов и методов, использующих производную целевой функции.*

6. С помощью метода Ньютона решить задачу минимизации функции

$$f(x) = x\,arctg\,x - \frac{1}{2}\ln(1 + x^2)\,.$$

Определить диапазон начальных приближений, для которых применим метод Ньютона. *Объяснить полученный результат.*

7. Решить задачу предыдущего пункта с помощью одной из описанных выше модификаций метода Ньютона (метода Марквардта или метода Ньютона-Рафсона).

Определить диапазон начальных приближений, для которых применима выбранная модификация метода Ньютона. *Сравнить полученные результаты с результатами выполнения предыдущего пункта.*

8. Составить программу нахождения глобального минимума многомодальных функций методом перебора и методом ломаных. С ее помощью решить один из следующих наборов задач:

а) $f(x)=\dfrac{\cos x}{x^2}\to\min,\quad x\in[1,12];\qquad f(x)=\dfrac{1}{10}x+2\sin 4x\to\min,\quad x\in[0,4];$

б) $f(x)=\dfrac{\cos(10x)}{e^x}\to\min,\quad x\in[1,5]$; $f(x)=0.3\cos 2x+2\sin(4x)\to\min,\quad x\in[0,4]$.

Сравнить найденные значения точек минимума с точными значениями, найденными аналитически. *Сделать выводы о сравнительных достоинствах и недостатках метода перебора и метода ломаных.*

9. Сдать лабораторную работу преподавателю, *ответив предварительно на все следующие контрольные вопросы.*

Контрольные вопросы к лабораторной работе 2

1. Пусть $f(x)$ - выпуклая дифференцируемая функция и $|f'(\bar{x})|\le\varepsilon$. Можно ли указать погрешности определения точки минимума x^* и минимального значения f^* по формулам $x^*=\bar{x}$, $f^*=f(\bar{x})$? Ответ пояснить рисунком.

2. Является ли условие $f'(\bar{x})=0$ достаточным для того, чтобы число $\bar{x}$ было точкой минимума унимодальной, но не выпуклой функции $f(x)$? Ответ сопроводить примером.

3. Указать класс функций, для которых точное определение точки минимума гарантировано в результате всего одной итерации метода Ньютона.

4. Сформулировать достаточные условия сходимости метода Ньютона.

5. Сформулировать достаточные условия монотонной сходимости метода Ньютона. Всегда ли в этом случае скорость сходимости будет квадратичной?

6. Для каких выпуклых дважды дифференцируемых функций метод золотого сечения приводит к цели за меньшее количество итераций, чем метод Ньютона?

7. Минимизировать функцию $f(x)=(x-1)^8\to\min, x\in[0;2]$ с помощью методов Ньютона и золотого сечения. Сравнить эти методы.

8. Сформулировать оценку погрешности определения минимума f^* многомодальной функции методом перебора.

9. Увеличение используемого значения константы Липшица L при реализации метода ломаных приводит к замедлению сходимости метода. Объяснить этот факт с помощью геометрической иллюстрации.

10. Показать с помощью рисунка, что если в методе ломаных используется ошибочно заниженное значение константы Липшица L, то задача минимизации может быть решена неверно.