Лекция 3

Численные методы одномерной минимизации

МЕТОДЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

МЕТОД НЬЮТОНА

Стратегия поиска

Стратегия метода Ньютона (Newton) состоит в построении последовательности точек $\{x^k\}, k = 0, 1, \ldots,$ таких, что $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right), \; k = 0, 1, \ldots$. Точки последовательности вычисляются по правилу

$$x^{k+1} = x^k - H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right), \qquad k = 0, 1, \ldots ,$$

где x^0 – задается пользователем, а направление спуска d^k определяется для каждого значения k по формуле $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$, величина шага $t_k = 1$.

МЕТОД НЬЮТОНА

Алгоритм

Шаг 1. Задать $x^0, \varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 > 0$, M – предельное число итераций. Найти градиент $\nabla f\left(x\right)$ и матрицу Гессе $H(x)$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 4. Проверить выполнение критерия окончания $\left\|\nabla f\left(x^k\right)\right\| \le \varepsilon_1$:

а) если неравенство выполнено, то расчет окончен и $x^* = x^k$;

б) в противном случае перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение неравенства $k \ge M$:

а) если неравенство выполнено, расчет окончен и $x^* = x^k$;

б) если нет, перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить элементы матрицы $H\left(x^k\right)$.

Шаг 7. Найти обратную матрицу $H^{-1}\left(x^k\right)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия $H^{-1}\left(x^k\right) > 0$:

а) если $H^{-1}\left(x^k\right) > 0$, то перейти к шагу 9;

б) если нет, то перейти к шагу 10, положив $d^k = -\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 9. Определить $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 10. Найти точку $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$,

положив $t_k = 1$, если $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$,

или выбрав t_k из условия $f\left(x^{k+1}\right) < f\left(x^k\right)$, если $d^k = -\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 11. Проверить выполнение условий

$$\left\|x^{k+1} - x^k\right\| < \varepsilon_2, \qquad \left|f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right)\right| < \varepsilon_2:$$

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k-1$, то расчет окончен, $x^* = x^{k+1}$;

б) в противном случае положить $k = k+1$ и перейти к шагу 3.

МЕТОД НЬЮТОНА–РАФСОНА

Алгоритм

Шаг 1. Задать $x^0, \varepsilon_1 > 0, \varepsilon_2 > 0, M$ – предельное число итераций. Найти градиент $\nabla f(x)$ и матрицу Гессе $H(x)$.

Шаг 2. Положить $k = 0$.

Шаг 3. Вычислить $\nabla f(x^k)$.

Шаг 4. Проверить выполнение условия $\left\| \nabla f(x^k) \right\| \le \varepsilon_1$:

а) если неравенство выполнено, то расчет закончен и $x^* = x^k$;

б) если нет, перейти к шагу 5.

Шаг 5. Проверить выполнение условия $k \ge M$:

а) если неравенство выполнено, расчет окончен и $x^* = x^k$;

б) если нет, перейти к шагу 6.

Шаг 6. Вычислить элементы матрицы $H(x^k)$.

Шаг 7. Найти обратную матрицу $H^{-1}\left(x^k\right)$.

Шаг 8. Проверить выполнение условия $H^{-1}\left(x^k\right) > 0$:

а) если условие выполняется, то найти $d^k = -H^{-1}\left(x^k\right)\nabla f\left(x^k\right)$;

б) если нет, то положить $d^k = -\nabla f\left(x^k\right)$.

Шаг 9. Определить $x^{k+1} = x^k + t_k\, d^k$.

Шаг 10. Найти шаг t_k^* из условия $\varphi\left(t_k\right) = f\left(x^k + t_k d^k\right) \to \min\limits_{t_k}$.

Шаг 11. Вычислить $x^{k+1} = x^k + t_k^* d^k$.

Шаг 12. Проверить выполнение неравенств

$$\left\| x^{k+1} - x^k \right\| < \varepsilon_2, \qquad \left| f\left(x^{k+1}\right) - f\left(x^k\right) \right| < \varepsilon_2:$$

а) если оба условия выполнены при текущем значении k и $k = k-1$, то расчет окончен и $x^* = x^{k+1}$;

б) в противном случае положить $k = k+1$ и перейти к шагу 3.

МЕТОДЫ НУЛЕВОГО ПОРЯДКА

МЕТОДЫ ОДНОМЕРНОЙ МИНИМИЗАЦИИ

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

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

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.

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^*.

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

З а м е ч а н и я.

1. Для методов одномерной минимизации типично задание априорной информации о положении точки минимума с помощью начального *интервала неопределенности* $L_0 = [a_0, b_0]$. 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. 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.

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

Метод дихотомии

Стратегия поиска

Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 1). 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.

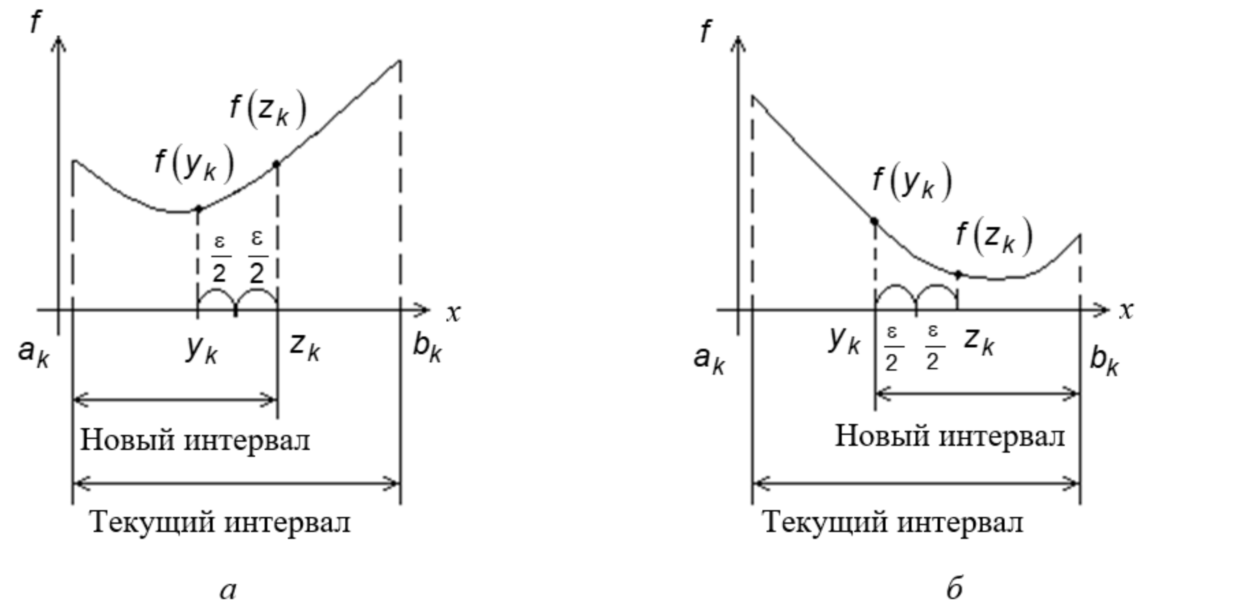

Рис. 1

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 $y_k = \dfrac{a_k + b_k - \varepsilon}{2}$, $f(y_k)$, $z_k = \dfrac{a_k + b_k + \varepsilon}{2}$, $f(z_k)$.

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. 1, *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. 1, *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: $x^* \cong \dfrac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$;

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

Метод золотого сечения

В методе золотого сечения в качестве точек вычисления функции выбираются точки золотого сечения.

Определение. Точка производит *золотое сечение отрезка*, если отношение длины всего отрезка к большей части равно отношению большей части к меньшей.

На отрезке $\left[a_0, b_0\right]$ 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 $\left[a_0, z_0\right]$, а точка z_0 – отрезка $\left[y_0, b_0\right]$(рис. 2).

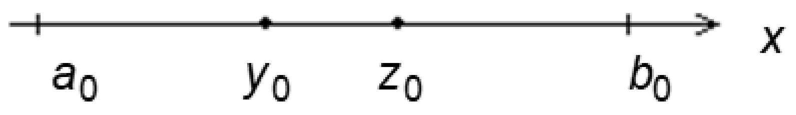

Рис. 2

Стратегия поиска

Задаются начальный интервал неопределенности и требуемая точность. Алгоритм уменьшения интервала опирается на анализ значений функции в двух точках (см. рис. 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.

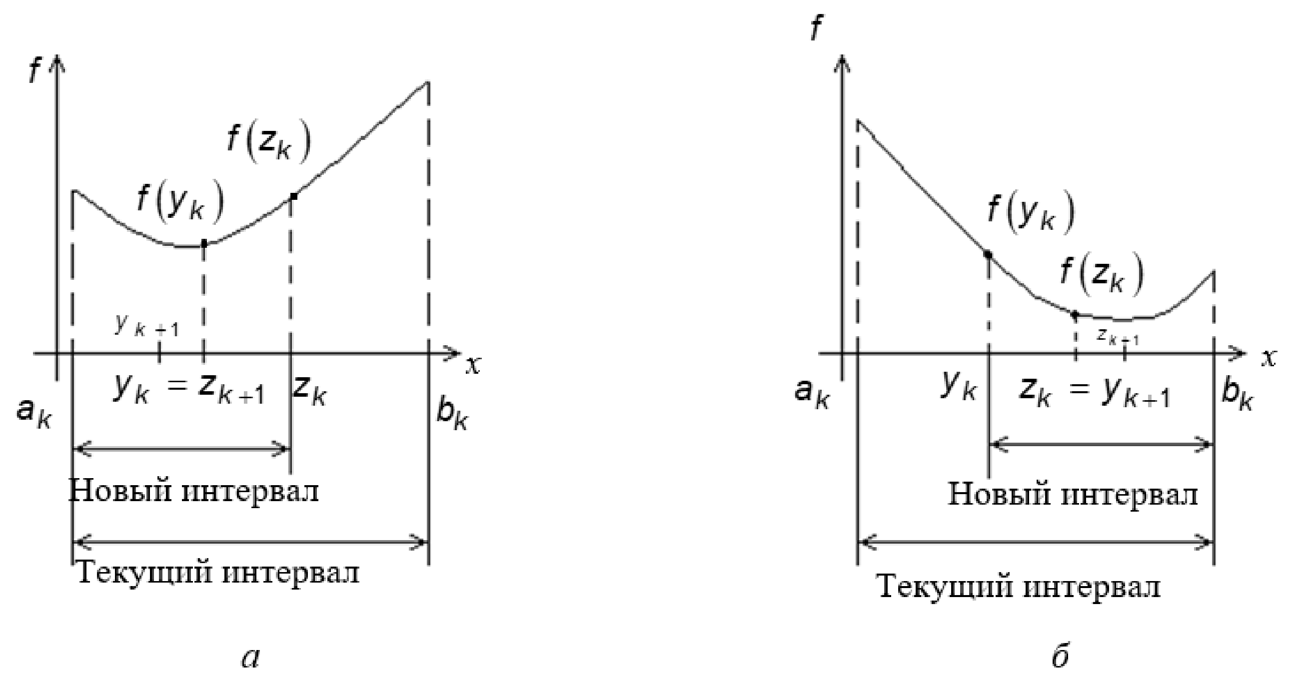

Рис. 3

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. 3, *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. 3, *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: $x^* \cong \dfrac{a_{k+1} + b_{k+1}}{2}$;

б) если $\Delta > l$, положить $k = k + 1$ и перейти к шагу 4.

Метод квадратичной интерполяции

Стратегия поиска

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.

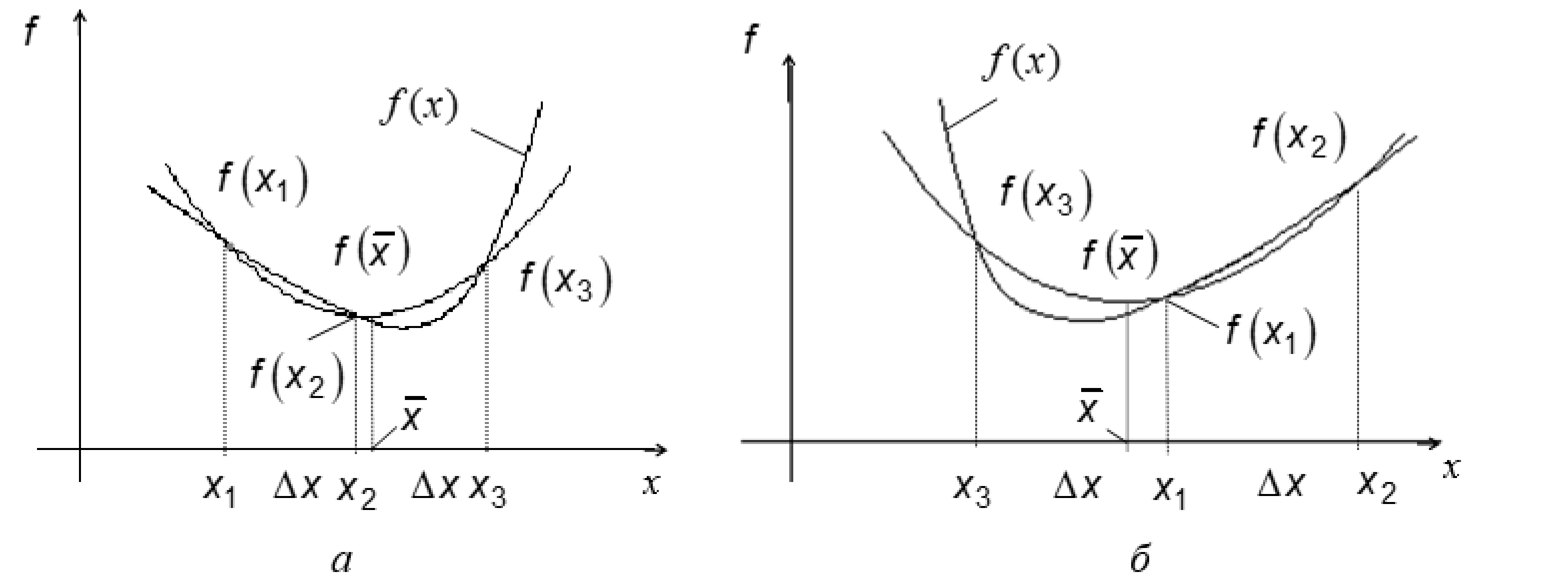

Рис. 4

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. 4, *а*);

б) если $f(x_1) \le f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 - \Delta x$ (рис. 4, *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:

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

и величину функции $f(\bar{x})$(рис. 4).

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:

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

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.