20. Безусл мног оптим. Метод полином интерполяции.

Метод квадратичной интерполяции. Метод Пауэлла.

метод кубической интерпол (Дэвидона)

Основные определения. Задачей многомерной оптимизации является минимизация функции $U=f(x_1,x_2,...,x_m)$ от m переменных (параметров) $x_1,x_2,...,x_m$. Если нет ограничений на параметры $x_1,...,x_m$, то говорят о глобальной безусловной минимизации, если есть ограничения на параметры $x_1,...,x_m$, то говорят об условной минимизации.

1. Основные определения. Задачей многомерной оптимизации является минимизация функции $U=f(x_1,x_2,...,x_m)$ от m переменных (параметров) $x_1,x_2,...,x_m$. Если нет ограничений на параметры $x_1,...,x_m$, то говорят о глобальной безусловной минимизации, если есть ограничения на параметры $x_1,...,x_m$, то говорят об условной минимизации.

Для сокращенного обозначения функции многих переменных удобно использовать векторное обозначение $f(\vec{x})$, при этом подразумевается, что каждой величине $\vec{x}$ сопоставлен свой единственный набор значений величин $x_1,...,x_m$. В соответствии с этим величину $\vec{x}$ можно рассматривать как точку (элемент) m-мерного линейного пространства независимых переменных $x_1,...,x_m$. Если в этом пространстве ввести единичные векторы $\vec{e}_1,...,\vec{e}_m$, поставленные в соответствие переменным $x_1,...,x_m$, то величину $\vec{x}$ можно рассматривать как вектор: $\vec{x} = x_1\vec{e}_1,...,x_m\vec{e}_m$, а операции сложения и вычитания производить по правилу векторов.

Общие критерии останова численных методов оптимизации функции многих переменных

1. Достигнута заданная норма градиента: $\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\| \le \varepsilon$
2. Достигнуто предельное количество итераций: $k \ge M$
3. Изменение значения функции и текущего приближения к точке оптимума меньше

заданных величин: $\left\| x^{(k+1)} - x^{(k)} \right\| < \varepsilon_1$ и $\left| f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \right| < \varepsilon_2$

Полиномиальная (алгебраическая) интерполяция

Если в качестве интерполяционной функции выбран многочлен от од ой переменной: $P(x)=a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x^3 + \ldots + a_n \cdot x^n$, такая интерполяция называется алгебраической интерполяцией. В этом случае СЛАУ для определения коэффициентов интерполяционного полинома имеет вид:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 \cdot x_0 + \cdots + a_n \cdot x_0^n = P_0 \\ a_0 + a_1 \cdot x_1 + \cdots + a_n \cdot x_1^n = P_1 \\ \ldots \\ a_0 + a_1 \cdot x_n + \cdots + a_n \cdot x_n^n = P_0 \end{cases}$$

а ее определитель:

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ & & \ldots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix}$$

отличен от нуля, так как узлы интерполяции попарно различны. Это известный из курса линейной алгебры определитель Вандермонда. Следовательно, решение задачи алгебраической интерполяции всегда существует и единственно.

Прямое решение этой системы никогда не используется в практических вычислениях. При больших ***n***система для определения коэффициентов интерполяции оказывается плохо обусловленной. Однако решение этой задачи можно построить другим способом:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

Такой вид записи алгебраического интерполяционного полинома называется интерполяционным полиномом в форме Лагранжа. Он удобен для теоретического рассмотрения, но на практике часто оказывается более удобной другая форма представления — полином в форме Ньютона.

Методы квадратичной интерполяции

Пусть известно значение функции f(x) в трех несовпадающих точках x_1, x_2, x_3. Тогда f(x) может аппроксимирована квадратичным полиномом вида:

$$P(x) = Ax^2 + Bx + C$$

где A,B,C– определяются из уравнения:

$$\begin{cases} Ax^2{}_1 + Bx_1 + C = f(x_1) = f_1 \\ Ax^2{}_2 + Bx_2 + C = f(x_2) = f_2 \\ Ax^2{}_3 + Bx_3 + C = f(x_3) = f_3 \end{cases}$$

После решения этих уравнений получаем:

$A=[(x_3-x_2)f_1+(x_1-x_3)f_2+(x_2-x_1)f_3]/\Delta$

$B=[(x_2^2-x_3^2)f_1+(x_3^2-x_1^2)f_2+(x_1^2-x_2^2)f_3]/\Delta$

$C=[x_2x_3(x_3-x_2)f_1+ x_1x_3 (x_1-x_3)f_2+ x_2x_1 (x_2-x_1)f_3]/\Delta$

$\Delta=(x_1-x_2)(x_2-x_3)(x_3-x_1)$

Точка минимума полинома $P(x)$ вычисляется следующим образом: $x_{\min} = -\dfrac{B}{2A}$, при $A > 0$

Тогда оценить точку оптимума функции f(x) можно значением $\tilde{x}$ (оценка оптимальности):

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

Алгоритм.

Шаг 1. Выбрать три точки $x_1 < x_2 < x_3$ такие что $f(x_1) > f(x_2)$ и $f(x_2) < f(x_3)$.

Шаг 2. Вычислить точку $\tilde{x}$, используя формулу определения точки минимума квадратичного полинома.

Шаг 3. Проверить условие окончания поиска. Если $\left|\min\{f_1, f_2, f_3\} - f(\tilde{x})\right| < \varepsilon_1$ и $\left|\min\{x_1, x_2, x_3\} - \tilde{x}\right| < \varepsilon_2$, то закончить поиск. В противном случае повторить шаг 4.

Шаг 4. Выбрать наилучшую точку $\left(\min\left\{x_1, x_2, x_3\right\}\right)$ или $\tilde{x}$ и две точки по обе стороны от нее. Перейти к шагу 2.

Этот метод имеет недостатки. Если $\phi(x)$ плохо аппроксимирует целевую функцию $f(x)$ в выбранной окрестности, то минимум функции $\phi(x)$ будет плохой оценкой для решения задачи. На практике точка $\tilde{x}$ может оказаться вне начального интервала неопределенности.

Метод квадратичной интерполяции сходится сверхлинейно.

Таким образом, методы исключения интервалов основаны на процедуре простого сравнения значений функции в двух пробных точках. Метод точечного оценивания позволяет определить точку оптимума с помощью полиномиальной аппроксимации. В условиях, когда интервалы сходимости сравнимы между собой, а исследуемая функция является достаточно гладкой и унимодальной, метод точечного оценивания сходится значительно быстрее, чем методы исключения интервалов. Однако при исследовании быстро изменяющихся функций наиболее надежными являются методы золотого сечения и Фибоначчи.

Метод Пауэлла (квадратичной интерполяции)

Шаг1. 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 $x_3 = x_1 + 2\Delta x$

б) если $f(x_1) \le f(x_2)$, положить $x_3 = x_1 - \Delta x$

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:

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

и величину функции $f(\tilde{x})$. Если знаменатель дроби на некоторой итерации обращается в ноль, 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:

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

Тогда

а) если оба условия выполнены, процедура закончена и $x^* \cong \tilde{x}$;

б) если хотя бы одно из условий не выполнено и $\tilde{x} \in [x_1, x_3]$, выбрать наилучшую точку ($x_{\min}$ или $\tilde{x}$) 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 $\tilde{x} \notin [x_1, x_3]$, то положить $x_1 = \tilde{x}$ и перейти к шагу 2.

Метод кубической интерполяции (Давидона)

Для кубической интерполяции в методе Давидона используется значение функций и ее производных, вычисленных в точках x_1, x_2.

Используется кубический полином следующего вида:

$$P(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2(x - x_2)$$

Параметры a_0, a_1, a_2, a_3 подбираются т.о., чтобы значениеP(x) иP'(x) в точках x_1, x_2совпадали со значениями f(x) иf'(x).

$$\phi'(x) = a_1 + a_2(x - x_1) + a_2(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2 + 2a_3(x - x_1)(x - x_2)$$

$$
\begin{cases}
f_1 = f(x_1) = a_0 \\
f_2 = f(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x_1) \\
f'_1 = f'(x_1) = a_1 + a_2(x_1 - x_2) \\
f'_2 = f'(x_2) = a_1 + a_2(x_2 - x_1) + a_3(x_2 - x_1)^2
\end{cases}
$$

$$\phi'(x) = 0$$

Решение, определяющее стационарную точку кубического полинома выглядит следующим образом:

$$
\tilde{x} = \begin{cases}
x_2, \text{ если } \mu < 0 \\
x_2 - \mu(x_2 - x_1), \text{ если } 0 \le \mu \le 1 \\
x_1, \text{ если } \mu > 1
\end{cases}
$$

$$\mu = \frac{f'_2 + \omega - z}{f'_2 - f'_1 + 2\omega}; \qquad z = \left[\frac{3(f_1 - f_2)}{x_2 - x_1}\right] + f'_1 + f'_2$$

$$
\omega = \begin{cases}
(z^2 - f'_1 f'_2)^{1/2}, \text{ если } x_1 < x_2 \\
-(z^2 - f'_1 f'_2)^{1/2}, \text{ если } x_1 > x_2
\end{cases}
$$

Эта формула гарантирует, что точка $\tilde{x}$ расположена между x_1, x_2.

Процесс поиска заканчивается, если производная в полученной точке достаточно мала, или процедура становится неэффективной.