3.5. Метод пошуку з використанням кубічної апроксимації

Відповідно до розглянутого методу підлягаючої мінімізації функція $f(\bar{x})$ апроксимується поліномом третього порядку. Логічна схема методу аналогічна схемі методу з використанням квадратичної апроксимації. Однак у цьому випадку побудова апроксимуючого полінома проводиться на основі меншого числа точок, оскільки в кожній точці можна обчислювати значення як функції, так і її похідної.

Робота алгоритму починається в довільно обраній точці x_1: знаходиться інша точка x_2, така, що похідні $f'(x_1)$ і $f'(x_2)$ мають різні знаки. Інакше кажучи, необхідно вмістити стаціонарну точку $\bar{x}$, в якій $f'(x_1) = 0$, в інтервал між x_1 і x_2. Апроксимуюча кубічна функція записується в наступному вигляді:

$$\bar{f}(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2(x - x_2) \quad (3.17)$$

Параметри рівняння (3.17) підбираються таким чином, щоб значення $\bar{f}(x)$ і її похідної у точках x_1 і x_2 збігалися зі значеннями $f(x)$ і $f'(x)$ в цих точках. Перша похідна функції $\bar{f}(x)$ дорівнює:

$$\frac{d\bar{f}(x)}{dx} = a_1 + a_2(x - x_1) + a_2(x - x_2) + a_3(x - x_1)^2 + 2a_3(x - x_1)(x - x_2) \quad (3.18)$$

Коефіцієнти a_0, a_1, a_2 й a_3 рівняння (1) визначаються за відомим значенням $f(x_1), f(x_2), f'(x_1)$і $f'(x_2)$ шляхом розв'язку наступної системи лінійних рівнянь:

$$f_1 = f(x_1) = a_0, \quad (3.19)$$

$$f_2 = f(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x), \quad (3.20)$$

$$f_1' = f'(x_1) = a_1 + a_2(x_1 - x_2), \quad (3.21)$$

$$f_2' = f'(x_2) = a_1 + a_2(x_2 - x_1) + a_3(x_2 - x_1)^2. \quad (3.22)$$

Помітимо, що дана система легко вирішується рекурсивним методом. Після того як коефіцієнти знайдені, діючи за аналогією з випадком квадратичної апроксимації, можна оцінити координату стаціонарної точки функції за допомогою апроксимуючого полінома (3.17). При цьому прирівнювання до нуля похідної (3.18) приводить до квадратного рівняння. Використовуючи формулу для обчислення коренів квадратного рівняння, запишемо розв'язок, що визначає стаціонарну точку апроксимуючого кубічного полінома, у наступному вигляді:

$$\bar{x}\begin{cases} x_2, & \text{якщо } \mu < 0, \\ x_2 - \mu(x_2 - x_1), & \text{якщо } 0 \le \mu \le 1, \\ x_1, & \text{якщо } \mu > 1, \end{cases} \quad (3.23)$$

де:

$$\mu = \frac{f_2' + \omega - z}{f_2' - f_1' + 2\omega}, \quad (3.24)$$

$$z = \left(\frac{3(f_1 - f_2)}{x_2 - x_1}\right) + f_1' + f_2', \quad (3.25)$$

$$\omega\begin{cases} (z^2 - f_1' f_2')^{1/2}, \text{якщо } x_1 < x_2, \\ -(z^2 - f_1' f_2')^{\frac{1}{2}}, \text{якщо } x_1 > x_2. \end{cases} \quad (3.26)$$

Формула (3.26) забезпечує належний вибір одного із двох коренів квадратного рівняння; для значень μ, що знаходяться в інтервалі від 0 до 1, формула (3.23) гарантує, що отримувана точка $\bar{x}$ розташована між x_1 і x_2. Потім знову вибираються дві точки для реалізації процедури кубічної апроксимації — $\bar{x}$ і одна із точок x_1 або x_2, причому значення похідної досліджуваної функції в цих точках повинні бути протилежні за знаком, і процедура кубічної апроксимації повторюється.

Наведемо формалізований опис алгоритму. Нехай задані початкова точка x_0, позитивна величина кроку Δ і параметри збіжності ε_1 й ε_2.

Крок 1. Обчислити $f'(x_0)$.

Якщо $f'(x_0) < 0$, то обчислити $x_{k+1}=x_k+2^k\Delta$ для значень k=0, 1…

Якщо $f'(x_0) > 0$, то обчислити $x_{k+1}=x_k-2^k\Delta$ для значень k=0, 1…

Крок 2. Обчислити значення $f'(x)$ в точках x_{k+1} при k=0, 1, 2, ... аж до точки x_m, у якій $f'(x_{m-1})f'(x_m) \leq 0$. Потім прийняти $x_1 = x_{m-1}, x_2 = x_m$. Обчислити значення f_1, f_2, f_1' і f_2' .

Крок 3. Знайти стаціонарну точку $\bar{x}$ апроксимуючого кубічного поліному, користуючись формулами (3.23) – (3.26).

Крок 4. Якщо $f(\bar{x}) < f(x_1)$, то перейти до кроку 5. У протилежному випадку обчислювати $\bar{x}$ по формулі $\bar{x} = \bar{x} + \frac{1}{2(\bar{x}-x_1)}$ доти, поки не буде виконуватися нерівність $f(\bar{x}) \leq f(x_1)$.

Крок 5. Перевірка на закінчення пошуку.

Якщо $|f'(\bar{x})| \leq \varepsilon_1$ і $\left|\left(\bar{x} - \frac{x_1}{\bar{x}}\right)\right| \leq \varepsilon_2$, пошук закінчити . Інакше прийняти або

а) $x_2 = x_1$ і $x_1 = \bar{x}$, якщо $f'(\bar{x})f'(x_1) < 0$, або

б) $x_1 = \bar{x}$, якщо $f'(\bar{x})f'(x_2) < 0$.

Потім перейти до кроку 3.

Помітимо, що кроки 1 і 2 реалізують процедуру пошуку меж інтервалу евристичним методом, до того ж зміна знаку похідної використовується як критерій переходу через точку оптимуму. На кроці 3 проводяться обчислення координати точки оптимуму апроксимуючого поліному. Крок 4 асоційований з перевіркою того факту, що отримана оцінка дійсно є поліпшеним наближенням до точки оптимуму. У випадку, коли значення похідної обчислюються безпосередньо, метод пошуку з використанням кубічної апроксимації, безумовно, є більш ефективним у порівнянні з кожним із наведених вище методів пошуку. Однак якщо значення похідної обчислюються шляхом диференціювання різниць, то перевагу варто віддати методу Пауела, який базується на квадратичній апроксимації.

Приклад 3.2. Пошук із використанням кубічної апроксимації і похідних

Знову розглянемо задачу, у якій потрібно мінімізувати $f(x) = 2x^2 + \frac{16}{x}$. Нехай x початкова точка $x_0 = 1$ і довжина кроку $\Delta = 1$. Як параметри збіжності використаємо: $\varepsilon_1 = 10^{-2}$ і $\varepsilon_2 = 3 \times 10^{-2}$,

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = 4x - \frac{16}{x^2}$$

Ітерація 1

Крок 1. $f'(1) = \ 12 < 0$. Отже, $x_1 = 1 + 1 = 2$.

Крок 2. $f'(2) = 4$

Тому що,$f'(1)f'(2) = \ -48 < 0$ стаціонарна точка розташована між 1 й 2.

Приймемо, $x_1 = 1, x_2 = 2$. Тоді $f_1 = 18, f_2 = 16, f_1' = \ -12, f_2' = 4$.

Крок 3.

$$z = \frac{3}{1(18 - 16)} + (-12) + 4 = \ -2,$$

$$\omega = +[4 - (-12)(4))]^{\frac{1}{2}} = (52)^{1/2} = 7{,}221,$$

$$\mu = \ \frac{4 + 7{,}221(-2)}{4 - (-12) + 2(7{,}221)} = 0,$$

$$\overline{x} = 2 - 0{,}4343(2 - 1) = 1{,}5657.$$

Крок 4. $f(1{,}5657) \ = \ 15{,}1219 \ < \ \ f(x_1) = \ 18$. Отже, продовжуємо пошук.
Крок 5. Перевірка на закінчення пошуку.
$f'(1{,}5657) = -0{,}2640$; пошук не закінчений.
Тому що $f'(\overline{x})f'(x_2) = (-0{,}2640)(4) < 0$, приймаємо $x_1 = \overline{x} = 1{,}5657$.

Ітерація 2

Крок 3.

$$z = \frac{3}{0{,}4343}(15{,}1219 - 16) + (-0{,}2640) + 4 = -2{,}3296,$$
$$\omega = +[(2{,}3296)^2 - (-0{,}2640)(4)]^{1/2} = 2{,}5462,$$
$$\mu = \frac{4 + 2{,}5462 - (-2{,}3296)}{4 - (-0{,}2640) + 2(2{,}5462)} = 0{,}9486,$$
$$\overline{x} = 2 - 0{,}9486(2 - 1{,}5457) = 1{,}5880.$$

.

Крок 4. $f(1{,}5880) = 15{,}1191\, f(x_1) = 15{,}1219$. Отже, продовжуємо пошук.

Крок 5. Перевірка на закінчення пошуку: $f'(1{,}5880) = \ 0{,}0072 < 10^{-2}$,

$$\left|\frac{1{,}5880 - 1{,}5657}{1{,}5880}\right| = 0{,}0140 < 3 \times 10^{-2}.$$

Пошук закінчено.