Численные методы

Численная оптимизация: функции одной переменной

Постановка задачи

$$f(x) \to \min$$

$f : \mathbf{R}^1 \to \mathbf{R}^1$ и $f \in \mathbf{C}_k$

Функция $f(x)$, определённая на множестве X, достигает своего *глобального минимума* в точке $x^* \in X$ в том и только в том случае, если

$$\forall x \in X \colon f(x^*) \leqslant f(x).$$

Функция $f(x)$, определённая на множестве X, имеет свой *локальный минимум* в точке $x^* \in X$ в том и только в том случае, если

$$f(x^*) \leqslant f(x) \text{ для всех } x \in X \text{ таких, что } \|x - x^*\| < \varepsilon.$$

Определения

Функция $f(x)$ является *унимодальной* на отрезке $a \leqslant b$ в том и только в том случае, если она монотонна по обе стороны от единственной на рассматриваемом отрезке оптимальной точки x^*.

Методы оптимизации

1. Нулевого порядка — используют только значение функции
   1. методы исключения интервалов
   2. с использованием интерполяции
2. Первого порядка — используют первую производную
3. Второго порядка — используют вторую производную

Data: f, x_0, Δ, $x_{\max}$
Result: $[x_l, x_r] \ni \arg\min f$
if $f(x_0 + \Delta) < f(x_0)$ **then**
    `// Минимум справа`
    $x_1 \leftarrow x_0 + \Delta$;
else
    if $f(x_0 - \Delta) < f(x_0)$ **then**
        `// Минимум слева`
        $\Delta \leftarrow -\Delta$;
        $x_1 \leftarrow x_0 + \Delta$;
    else
        `// Отрезок найден`
        Результат: $[x_0 - \Delta, x_0 + \Delta]$;

$k \leftarrow 0$;
while $f(x_{k-1}) > f(x_k)$ **do**
    $k \leftarrow k + 1$;
    $\Delta \leftarrow 2\Delta$;
    $x_{k+1} \leftarrow x_k + \Delta$;
    if $k \geqslant k_{\max}$ **then**
        `// Ошибка: слишком много итераций`
        Стоп;
if $x_{k-1} < x_{k+1}$ **then**
    Результат: $[x_{k-1}, x_{k+1}]$;
else
    Результат: $[x_{k+1}, x_{k-1}]$;

Метод трёх точек

Data: f, $[L, R]$, ε
Result: $[L, R]$, $R - L < \varepsilon$
$x_m \leftarrow (L + R)/2$; $f_m \leftarrow f(x_m)$;
$x_l \leftarrow (L + x_m)/2$; $f_l \leftarrow f(x_l)$;
$x_r \leftarrow (x_m + R)/2$; $f_r \leftarrow f(x_r)$;
while $R - L \geqslant \varepsilon$ **do**
    if $f_m > f_r$ **then**
        $L \leftarrow x_m$; $x_m \leftarrow x_r$; $f_m \leftarrow f_r$;
    else
        if $f_l < f_m$ **then**
            $R \leftarrow x_m$; $x_m \leftarrow x_l$; $f_m \leftarrow f_l$;
        else
            $L \leftarrow x_l$; $R \leftarrow x_r$;
    $x_l \leftarrow (L + x_m)/2$; $f_l \leftarrow f(x_l)$;
    $x_r \leftarrow (x_m + R)/2$; $f_r \leftarrow f(x_r)$;

Метод золотого сечения

Data: f, $[l, r]$, ε, $\phi = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$
Result: $[l, r]$, $r - l < \varepsilon$
$L = r - l$; $x_l \leftarrow r - \phi L$; $f_l \leftarrow f(x_l)$; $x_r \leftarrow l + \phi L$; $f_r \leftarrow f(x_r)$;
while $L \geqslant \varepsilon$ **do**
  if $f_l > f_r$ **then**
    $l \leftarrow x_l$; $L = r - l$; $x_l \leftarrow x_r$; $f_l \leftarrow f_r$;
    $x_r \leftarrow l + \phi L$; $f_r \leftarrow f(x_r)$;
  else
    if $f_l < f_r$ **then**
      $r \leftarrow x_r$; $L = r - l$; $x_r \leftarrow x_l$; $f_r \leftarrow f_l$;
      $x_l \leftarrow r - \phi L$; $f_l \leftarrow f(x_l)$;
    else
      $l \leftarrow x_l$; $r \leftarrow x_r$; $L = r - l$;
      $x_l \leftarrow r - \phi L$; $f_l \leftarrow f(x_l)$; $x_r \leftarrow l + \phi L$; $f_r \leftarrow f(x_r)$;

Использование квадратичной интерполяции

$$\begin{array}{ccc} x_1 & x_2 & x_3 \\ f_1 & f_2 & f_3 \end{array}$$

$$q(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)$$

$$\begin{aligned} a_0 &= f_1 \\ a_1 &= \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \\ a_2 &= \frac{1}{x_3 - x_2}\left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}\right) \end{aligned}$$

$$\hat{x} = \frac{x_2 + x_1}{2} - \frac{a_1}{2a_2}$$

Data: x_1, Δx, ε_x, ε_f
$x_2 \leftarrow x_1 + \Delta x$; $f_1 \leftarrow f(x_1)$; $f_2 \leftarrow f(x_2)$;
if $f_1 > f_2$ **then**
    $x_3 \leftarrow x_2 + \Delta x$; $f_3 \leftarrow f(x_3)$;
else
    $x_3 \leftarrow x_1 - \Delta x$; $f_3 \leftarrow f(x_3)$;

repeat
    $F_{\min} \leftarrow \min\{f_1, f_2, f_3\}$;
    $X_{\min}$ — точка x_i, соответствующая $F_{\min}$;
    Вычислить $\hat{x}$;
    Выбрать «наилучшую точку» ($X_{\min}$ или $\hat{x}$) и две точки по обе стороны от неё. Обозначить эти точки в естественном порядке.
until $|F_{\min} - f(\hat{x})| \geqslant \varepsilon_f$ *или* $|X_{\min} - \hat{x}| \geqslant \varepsilon_x$;

Метод средней точки (поиск Больцано)

Решение уравнения

$$f'(x) = 0$$

методом деления отрезка пополам.

Использование кубической интерполяции

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

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

Использование кубической интерполяции

$$\hat{x} = \begin{cases} x_2, & \mu < 0 \\ x_2 - \mu \cdot (x_2 - x_1), & 0 \leqslant \mu < 1 \\ x_1, & \mu > 1 \end{cases}$$

$$\mu = \frac{f_2' + w - z}{f_2' - f_1' + 2w}$$

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

$$w = \begin{cases} \sqrt{z^2 - f_1' f_2'}, & x_1 < x_2 \\ -\sqrt{z^2 - f_1' f_2'}, & x_1 > x_2 \end{cases}$$

Метод Ньютона–Рафсона

Решение уравнения

$$f'(x) = 0$$

методом Ньютона.

Метод Ньютона–Рафсона

Решение уравнения

$$f'(x) = 0$$

методом Ньютона.

$$x_0, \qquad x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

Метод хорд

$$z = R - \frac{f'(R)}{\big(f'(R) - f'(L)\big)/(R - L)}$$