

Numeryczne algorytmy wyznaczania minimum funkcji jednej zmiennej

mgr Radosław MATUSIK

Absolwent Uniwersytetu Łódzkiego, od 2006 roku bierze udział w projekcie programistycznym na macierzystej uczelni. Jego zainteresowania naukowe obejmują m.in. stabilność sieci neuronowych, konstruowanie funkcji Lapunowa oraz szeroko pojęte metody numeryczne. Prywatnie fan Programu Trzeciego Polskiego Radia (prowadzi serwis internetowy poświęcony rozgłośni), dobrej muzyki i literatury. Fotograf-amator.



e-mail: radmat@math.uni.lodz.pl

Streszczenie

W artykule przedstawiono kilka wybranych numerycznych algorytmów wyznaczania minimum funkcji jednej zmiennej. Procedury te zaprezentowane są od strony teoretycznej, a także, dzięki specjalnie napisanej aplikacji, od strony praktycznej. Na podstawie artykułu można się dowiedzieć, który z zaprezentowanych algorytmów jest najskuteczniejszy dla danej klasy funkcji (tj. wyznacza minimum funkcji w możliwie dużej liczbie badanych punktów, minimum to wyznaczone jest w możliwie najmniejszej liczbie kroków, a także z odpowiednio dużą ilością poprawnych cyfr ułamkowych).

Abstract

In this article are introduced some numerical algorithms finding minimum function of one variable. These procedures are represented from a theoretical side and thanks to special application, from a practical side. In this article we may learn which of presented algorithms is the most effective (that means: which finds minimum in possibly a lot of points, this minimum is appointed in a minimal number of steps and with properly a lot of valid fractional digits).

Słowa kluczowe: algorytmy numeryczne, optymalizacja funkcji, metody numeryczne

Keywords: numerical algorithms, functions optimization, numerical methods

1. Wstęp

Zadanie optymalizacji funkcji jednej zmiennej jest najprostszym typem zadań optymalizacyjnych. Mimo to, w teorii i praktyce analiza tego typu zadań zajmuje bardzo ważne miejsce. Wiąże się to nie tylko z najczęstszym stosowaniem w praktyce inżynierskiej, ale także z wykorzystywaniem jednowymiarowych metod optymalizacji do analizy różnych podzadania, które wynikają podczas rozwiązywania zadań optymalizacji funkcji w przestrzeni wielowymiarowej. Lokalne metody optymalizacji mogą służyć do znajdowania lokalnych minimów energii, natomiast globalne metody optymalizacji do teoretycznego przewidywania najstabilniejszych struktur krystalicznych, czy też struktur natiwnych białek.

Dla uproszczenia, w niniejszym artykule przez optymalizację funkcji będziemy rozumieć jej minimalizację. Minimum funkcji jednej zmiennej może być wyznaczone bez ograniczeń, z ograniczeniami równościowymi, bądź też z ograniczeniami nierównościowymi. W artykule zaprezentowane są wybrane metody rozwiązujące pierwszy z wymienionych problemów minimalizacji. Teoretyczna znajomość metod optymalizacji spowodowała opracowanie wielu algorytmów realizujących to zagadnienie. Kilka wybranych z nich oraz ich modyfikacje przedstawionych jest w niniejszym artykule.

2. Przegląd metod bezgradientowych

Metody bezgradientowe są to metody poszukiwania minimum funkcji, w których w każdej iteracji wykorzystywane są informacje jedynie o wartościach minimalizowanej funkcji.

1. Metoda α -podziału

Metoda α -podziału jest bardzo podobna do powszechnie znanej metody złotego podziału. Różnica polega na sposobie doboru współczynnika redukcji przedziału. W metodzie złotego podziału współczynnik ten wynosi w przybliżeniu 0.618, natomiast w opisywanej metodzie α -podziału wskaźnik ten można wybrać dowolnie z przedziału $[0,1]$. W metodzie α -podziału niezależnie od spełnienia warunku $f(\lambda_k) < f(\mu_k)$, bądź $f(\lambda_k) > f(\mu_k)$ dokonuje się podstawienia $\lambda_{k+1} = a_{k+1} + (1-\alpha)(b_{k+1} - a_{k+1})$ oraz $\mu_{k+1} = a_{k+1} + \alpha(b_{k+1} - a_{k+1})$, gdzie $\alpha \in [0,1]$ jest współczynnikiem redukcji przedziału.

2. Metoda Fibonacciego

Metoda Fibonacciego jest liniową procedurą wyznaczania minimum funkcji f w określonym przedziale. Bazuje ona na ciągu Fibonacciego, który definiuje się następująco: $F_0 = F_1 = 1$, $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$, $n = 1, 2, \dots$

Podobnie jak w metodzie α -podziału, metoda Fibonacciego wymaga obliczenia dwóch wartości funkcji w pierwszej iteracji i tylko jednej w każdej następnej. Jednakże w metodzie Fibonacciego współczynnik podziału przedziału nie jest stały, tylko zmienia się w każdej iteracji. Również w przeciwieństwie do zaprezentowanej wcześniej procedury, metoda Fibonacciego wymaga wyznaczenia na początku liczby kroków. Liczbę iteracji n wybieramy jako numer liczby Fibonacciego, dla której

spełniona jest nierówność $F_n > \frac{b_1 - a_1}{\varepsilon}$, gdzie a stanowi lewy

kraniec przedziału, b prawy, natomiast ε długość przedziału. Długość tego przedziału jest redukowana w k -tej iteracji do

ilorazu $\frac{F_{n-k}}{F_{n-k+1}}$. Stąd po $n-1$ iteracjach długość przedziału jest

redukowana z $b_1 - a_1$ do $b_n - a_n = \frac{b_1 - a_1}{F_n}$.

3. Metoda aproksymacji kwadratowej

Kolejny zaprezentowany algorytm wyznaczania minimum funkcji jednej zmiennej oparty jest na interpolacji kwadratowej. Wymaga się jedynie, aby w otoczeniu minimum daną funkcję dało się aproksymować wielomianem drugiego stopnia. Rozważmy funkcję $f(\lambda)$ dla $\lambda \geq 0$. Wartości funkcji spełniające związek $f_1 \geq f_2$ i $f_2 \leq f_3$, gdzie $f_j \equiv f(\lambda_j)$ dla $j = 1, 2, 3$ wyliczane są w trzech kolejnych punktach spełniających zależność $0 \leq \lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$. Punkty te posłużą do zbudowania wielomianu interpolacyjnego drugiego stopnia. Zauważmy, że jeżeli $f_1 = f_2 = f_3$, to zgodnie z charakterem funkcji f każdy z tych punktów stanowi minimum danej funkcji. Stąd zakładamy, że co najmniej jedna z nierówności $f_1 > f_2$ oraz $f_2 < f_3$ jest prawdziwa. Następnie wybieramy punkt $\lambda_1 = 0$ i badamy próbny

punkt λ_x , który może być długością kroku w poprzedniej iteracji. Podstawiamy $f_x = f(\lambda_x)$. Jeśli $f_x > f_1$, to podstawiamy $\lambda_3 = \lambda_x$ i znajdujemy λ_2 poprzez wielokrotne połowienie przedziału $[\lambda_1, \lambda_2]$. Z drugiej strony, jeżeli $f_x < f_1$, to podstawiamy $\lambda_2 = \lambda_x$ i znajdujemy λ_3 poprzez dwukrotne zwiększenie długości przedziału $[\lambda_1, \lambda_2]$. W ten sposób otrzymujemy trzy punkty. Dalej dokonujemy ekstrapolacji poszukiwanego ekstremum poprzez poprowadzenie krzywej przechodzącej przez te punkty, która znajduje minimalny punkt. Punkt ten musi leżeć wewnątrz przedziału $[\lambda_1, \lambda_2]$. W konsekwencji punkt ten zostaje wprowadzony w miejsce jednego z początkowych. Procedura ta powtarzana jest do momentu spełnienia odpowiedniego kryterium końca.

Aby wyznaczać kolejne przybliżenia minimum funkcji, w algorytmie zastosowany został wzór Powella, który wynika z wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a opartego na następujących założeniach: Znamy wartości funkcji w punktach λ_1 , λ_2 oraz λ_3 , które wynoszą odpowiednio f_1 , f_2 i f_3 , przy czym punkty te spełniają warunek $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$. W związku z poczynionymi założeniami, wzór interpolacyjny Lagrange'a przyjmuje postać:

$$f(\lambda) = \frac{f_1(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3)}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)} + \frac{f_2(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_3)}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_3)} + \frac{f_3(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)}.$$

Jak wiadomo, warunkiem koniecznym istnienia w punkcie λ_x ekstremum powyższego wyrażenia jest warunek $\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = 0$

dla $\lambda = \lambda_x$. Zatem

$$\frac{f_1(2\lambda_x - (\lambda_2 + \lambda_3))}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)} + \frac{f_2(2\lambda_x - (\lambda_1 + \lambda_3))}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_3)} + \frac{f_3(2\lambda_x - (\lambda_1 + \lambda_2))}{(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)} = 0.$$

$$\text{Stąd: } \lambda_x = \frac{1}{2} \frac{f_1(\lambda_2^2 - \lambda_3^2) + f_2(\lambda_3^2 - \lambda_1^2) + f_3(\lambda_1^2 - \lambda_2^2)}{f_1(\lambda_2 - \lambda_3) + f_2(\lambda_3 - \lambda_1) + f_3(\lambda_1 - \lambda_2)}.$$

3. Przegląd metod gradientowych

Metody gradientowe są to metody poszukiwania minimum funkcji, w których w każdej iteracji wykorzystywane są informacje o wartościach minimalizowanej funkcji, a także informacje o wartości gradientu.

1. Metoda Steffensena

Metoda Steffensena (podobnie jak wcześniej opisywane w artykule metody) pozwala także na wyznaczanie pierwiastków równania nieliniowego. W tym przypadku metoda ta pozwalała na uniknięcie obliczania pochodnej funkcji, która jest zastąpiona dwupunktową formułą różniczkowania. Inaczej sytuacja wygląda w przypadku wyznaczania minimum funkcji tą metodą, gdzie nie da się uniknąć wyznaczenia pierwszej pochodnej badanej funkcji. Ogólna postać metody Steffensena wygląda następująco:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{f'(\lambda_k)}{g'(\lambda_k)}, \text{ gdzie } g'(\lambda_k) = \frac{f'(\lambda_k + f'(\lambda_k)) - f'(\lambda_k)}{f'(\lambda_k)},$$

przy czym $g'(\lambda_k) \neq 0$. Z dwóch ostatnich równości otrzymujemy

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{[f'(\lambda_k)]^2}{f'(\lambda_k + f'(\lambda_k)) - f'(\lambda_k)}.$$

Zastosowany tutaj algorytm Steffensena wymaga podania jedynie punktu startowego. Procedura jest zatrzymywana, gdy $|\lambda_{k+1} - \lambda_k| < \varepsilon$, gdzie $\varepsilon > 0$ jest przyjętą precyzją dokładności wyznaczania minimum.

2. Metoda Newtona

Metoda Newtona bazuje na wykorzystaniu kwadratowej aproksymacji funkcji f w danym punkcie λ_k . Kwadratowa

aproksymacja q dana jest wzorem:

$$q(\lambda) = f(\lambda_k) + f'(\lambda_k)(\lambda - \lambda_k) + 0.5 f''(\lambda_k)(\lambda - \lambda_k)^2.$$

Punkt λ_k wybierany jest jako punkt, w którym pierwsza pochodna q wynosi zero, co daje $f(\lambda_k) + f''(\lambda_k)(\lambda_{k+1} - \lambda_k) = 0$.

Stąd otrzymujemy: $\lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{f'(\lambda_k)}{f''(\lambda_k)}$, przy czym $f''(\lambda_k) \neq 0$.

Zatem w każdej iteracji nowy punkt wybierany jest na podstawie znajomości punktu poprzedniego oraz wartości pierwszej i drugiej pochodnej w tym punkcie. Warto zauważyć, że metoda ta może być zastosowana tylko do dwukrotnie różniczkowalnych funkcji. Procedura jest zatrzymywana, gdy $|\lambda_{k+1} - \lambda_k| < \varepsilon$ lub gdy $|f'(\lambda_k)| < \varepsilon$, gdzie $\varepsilon > 0$ jest przyjętą precyzją dokładności wyznaczania minimum.

3. Metoda Halleya

Metoda Halleya jest pewną modyfikacją zaprezentowanej powyżej metody Newtona. Do wyznaczenia minimum funkcji potrzebna jest jedynie znajomość punktu startowego. Obliczenia są zatrzymywane, gdy wartość bezwzględna różnicy między dwoma kolejnymi przybliżeniami jest mniejsza od zadanej precyzji obliczeń. W metodzie Halleya kolejne przybliżenia minimum

$$\text{obliczane są według wzoru: } \lambda_{k+1} = \lambda_k - \frac{1}{\frac{f'''(\lambda_k)}{f'(\lambda_k)} - \frac{f''(\lambda_k)^2}{2f'(\lambda_k)}}.$$

Warto zwrócić uwagę na fakt, że metoda ta może być zastosowana do minimum trzykrotnie różniczkowalnych funkcji.

4. Modyfikacje metod gradientowych

W poprzednim rozdziale zaprezentowane zostały gradientowe metody wyznaczania minimum funkcji jednej zmiennej w klasycznej postaci. W przypadku, gdy wyznaczenie gradientu jest skomplikowane, bądź też wymagałoby wykonania wielu operacji, obliczanie gradientu danej funkcji wprost można zastąpić poprzez aproksymację odpowiedniej pochodnej. Zatem modyfikacje metod gradientowych będą polegały na zastąpieniu pochodnych odpowiednimi ilorazami różnicowymi:

$$f'(\lambda_0) \approx \frac{f(\lambda_0 + h) - f(\lambda_0 - h)}{2h},$$

$$f''(\lambda_0) \approx \frac{f(\lambda_0 + h) - 2f(\lambda_0) + f(\lambda_0 - h)}{h^2},$$

$$f'''(\lambda_0) \approx \frac{-f(\lambda_0 + 3h) + 8f(\lambda_0 + 2h) - 13f(\lambda_0 + h) + 13f(\lambda_0 - h) - 8f(\lambda_0 - 2h) + f(\lambda_0 - 3h)}{8h^3}.$$

5. Przebieg testów

W niniejszym rozdziale porównane zostaną od strony praktycznej uprzednio zaprezentowane metody. Algorytmy te zostaną porównane pod kątem ilości wykonanych kroków potrzebnych do wyznaczenia minimum zadaną dokładnością, wpływu doboru przedziału (bądź punktu startowego) na szybkość zbieżności (lub jej brak), a także na liczbę poprawnych cyfr ułamkowych. Eksperymentalnie wyznaczony zostanie także rząd zbieżności każdej z metod. Aby zrealizować pierwszą część testu, tj. wyznaczyć liczbę iteracji potrzebnych do znalezienia minimum, obliczane będą w każdym kroku wartości danej funkcji. Aby móc wyznaczyć liczbę poprawnych cyfr ułamkowych, z jaką wyznaczone zostało minimum każdej z funkcji, na każdym przedziale (bądź punkcie startowym) wyznaczona zostanie wartość błędu bezwzględnego, z jakim wyznaczone zostało minimum. Do testów wybrane zostały następujące funkcje, które osiągają minimum w punktach (przybliżenie do piętnastu cyfr):

- a) $f_1(x) = x^2 - \sin x$, $x_0 = 0.450183611294873$
 b) $f_2(x) = x^4 + 2x^3 - 7x^2 + 12x$, $x_1 = -2.561552812808831$,
 $x_2 = 1.561552812808831$
 c) $f_3(x) = \frac{-x}{1+x^2}$, $x_0 = 0.000000000000000$

Mając daną wartość błędu bezwzględnego, można będzie wyznaczyć ilość poprawnych cyfr ułamkowych, wykorzystując nierówność $d < 0.5 \cdot 10^{-t}$, gdzie d jest wartością błędu bezwzględnego, natomiast t jest liczbą naturalną spełniającą tą nierówność. Natomiast aby wyznaczyć rząd zbieżności każdej z metod wykorzystana zostanie definicja rzędu zbieżności. W celu praktycznego porównania metod, napisana została aplikacja realizująca obliczenia. Oczywiście, aby porównanie metod było wiarygodne, dla każdej funkcji ustalone zostały przedziały poszukiwania minimum, i w tych przedziałach przeprowadzone zostały procedury testujące. Analogicznie, metody, które do działania potrzebują jedynie punktu startowego, zostały przetestowane dla tych samych punktów startowych ustalonych odpowiednio dla każdej z funkcji. W artykule nie będzie rozpatrywany dosyć oczywisty wpływ dokładności wyznaczania minimum na szybkość zbieżności metod. Wiadomym bowiem jest, że przyjęcie większej precyzji obliczeń wymagałoby dla każdej z metod wykonania większej liczby kroków. Natomiast celem artykułu jest porównanie szybkości zbieżności metod przy dowolnie ustalonej precyzji obliczeń. Do testów wybrana została odpowiednia dokładność, dla której sprawdzone zostały wszystkie metody i wszystkie funkcje. Przyjmujemy, że minimum funkcji będzie wyznaczane z dokładnością $\varepsilon = 10^{-5}$. Wszystkie prezentowane poniżej wykresy przedstawiają liczbę iteracji potrzebnych do wyznaczenia minimum danej funkcji w zależności od wybranego punktu startowego, bądź przedziału poszukiwania minimum.

Metoda α -podziału jest zbieżna do minimum dla wszystkich rozpatrywanych funkcji na każdym z badanych przedziałów. Jest to możliwe m.in. dzięki odpowiednio dobranemu współczynnikowi α . Najlepsze wyniki zostały osiągnięte dla $\alpha = 0.7$. Natomiast dla $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.2$, $\alpha = 0.3$, $\alpha = 0.4$, $\alpha = 0.5$ oraz $\alpha = 0.6$ dla funkcji f_1 rozpatrywanej na przedziale $[-4, 1.2]$ nie została osiągnięta zbieżność do minimum, natomiast dla $\alpha = 0.7$ zbieżność do punktu będącego minimum została osiągnięta w 37 krokach, dla $\alpha = 0.8$ w 59 krokach, natomiast dla $\alpha = 0.9$ aż w 125 krokach. Minimum każdej z funkcji wyznaczone zostało z 6 lub 7 poprawnymi cyframi ułamkowymi. Dla każdej z badanych funkcji metoda jest zbieżna liniowo.

W metodzie Fibonacciego liczba iteracji potrzebnych do wyznaczenia minimum zwiększa się wraz ze wzrostem długości przedziału, w którym poszukiwane jest minimum. W algorytmie tym, w przeciwieństwie do innych zaprezentowanych w artykule, najpierw musi być znana liczba kroków potrzebnych do wyznaczenia minimum. Liczba ta równa jest najmniejszemu numerowi liczby Fibonacciego, dla której spełniony jest warunek $F_n = \frac{b_1 - a_1}{\varepsilon}$, gdzie a_1 , b_1 stanowią krańce wejściowego przedziału, natomiast $\varepsilon > 0$ jest przyjętą precyzją obliczeń. Dla dużych wartości $b_1 - a_1$ oraz małej precyzji obliczeń, wyznaczenie minimum może nie być możliwe ze względu na trudności z wygenerowaniem odpowiednio dużej liczby Fibonacciego, np. dla funkcji f_3 poszukiwane minimum na przedziale $[-4, 4]$ przy przyjętej precyzji obliczeń wynoszącej $\varepsilon = 10^{-5}$ wymagałoby wygenerowania 800000 liczb Fibonacciego. Metoda ta pozwala na bardzo dokładne wyznaczenie minimum (nawet z 12 poprawnymi cyframi

ułamkowymi dla funkcji f_3 na przedziale $[-1, 4]$). Warto zwrócić uwagę na fakt, że w tym przypadku przedział $[-1, 4]$ zawiera także maksimum funkcji. Jednak w większości rozważanych przedziałów, minimum funkcji zostaje wyznaczone z dokładnością od 4 do 6 poprawnych cyfr ułamkowych. Dla każdej z badanych funkcji metoda Fibonacciego jest zbieżna liniowo.

Metoda aproksymacji kwadratowej daje bardzo szybką zbieżność do poszukiwanego minimum dla funkcji f_1 , ale na odpowiednio dobranym przedziale. Warto zauważyć, że metoda ta jest jak do tej pory jedyną, która nie daje zbieżności do minimum dla funkcji unimodalnej (funkcja f_1) na przedziale $[-4, 4]$. W innych przypadkach wyznaczenie minimum także może być niemożliwe ze względu na charakter badanej funkcji, ponieważ nie zawsze dla danej funkcji na rozpatrywanym przedziale da się skonstruować wielomian drugiego stopnia, który dobrze będzie aproksymował daną funkcję. Metoda aproksymacji kwadratowej umożliwia poszukiwanie minimum również poza przedziałem, w którym to minimum się znajduje. Procedura ta jest również skuteczna dla funkcji osiągającej kilka minimów. Jednak i w tym przypadku zbieżność (bądź jej brak) uzależniony jest od odpowiednio dobrego przedziału. Dla funkcji f_2 dobrym przedziałem nie jest $[0, 2]$ mimo, że zawiera on minimum. W przeciwieństwie do uprzednio zaprezentowanych metod, dla których liczby kroków dla danej funkcji na różnych przedziałach różniły się nieznacznie, w metodzie aproksymacji kwadratowej otrzymuje się duże różnice. Również w przeciwieństwie do innych metod, w procedurze tej liczba kroków potrzebnych do wyznaczenia minimum nie zwiększa się wraz ze wzrostem długości przedziału. Metoda aproksymacji kwadratowej dla źle dobranych przedziałów może dać tylko 1-2 poprawne cyfry ułamkowe, natomiast w przypadku, gdy na odpowiednim przedziale da się zbudować wielomian drugiego stopnia, który dobrze będzie aproksymował funkcję w pobliżu minimum, ilość poprawnych cyfr ułamkowych może być maksymalna w przyjętej precyzji obliczeń i wynosić 15. Dla każdej z badanych funkcji metoda ta jest zbieżna liniowo.

W przypadku metody Steffensena na podstawie przeprowadzonych testów widać, że jeżeli została osiągnięta zbieżność do minimum, to jest ono wyznaczane z dużą ilością poprawnych cyfr ułamkowych (w najgorszym przypadku z 8, natomiast w najlepszym ze wszystkimi poprawnymi w przyjętej precyzji obliczeń). Dla funkcji f_1 w każdym z rozpatrywanych punktów startowych metoda jest zbieżna do minimum z tą samą ilością poprawnych cyfr ułamkowych. Dla funkcji, która posiada dwa minima, tj. f_2 metoda Steffensena w każdym z rozpatrywanych przypadków znajduje minimum leżące bliżej punktu startowego. Jednak w przypadku tej funkcji do wyznaczenia minimum procedura ta potrzebowała bardzo dużej liczby kroków (w najlepszym przypadku 35, w najgorszym natomiast aż 6017). Dla każdej z badanych funkcji metoda jest zbieżna nadliniowo.

W przypadku zmodyfikowanej metody Steffensena zbieżność do minimum uzyskiwana jest w tej samej liczbie kroków, jak miało to miejsce w przypadku metody „oryginalnej”. Natomiast dla funkcji f_2 znalezienie minimum nie jest możliwe dla każdego z rozważanych punktów startowych, podczas gdy w przypadku metody wykorzystującej pochodną wprost, rozpoczęcie obliczeń z każdego z testowanych punktów startowych prowadziło do zbieżności do poszukiwanego minimum. Oczywiście w każdym z rozważanych przypadków minimum wyznaczane jest z mniejszą ilością poprawnych cyfr ułamkowych, niż w przypadku metody Steffensena. Dla każdej z badanych funkcji metoda jest zbieżna liniowo.

W przypadku metody Newtona, gdy zostanie osiągnięta zbieżność do minimum, to jest ono z reguły wyznaczane bardzo dokładnie (rozpoczęcie obliczeń z większości punktów startowych daje 14

poprawnych cyfr ułamkowych). W przypadku funkcji f_2 , która posiada dwa minima, procedura Newtona zawsze znajduje minimum leżące bliżej punktu startowego. Metoda ta dla złe dobranego punktu startowego może być zbieżna do maksimum. Tak się dzieje w przypadku funkcji f_2 i punktu $x_0 = -0.5$ lub dla funkcji f_3 i punktu $x_0 = -1$. Oczywiście metoda Newtona może być także rozbieżna (dla funkcji f_3 i punktu startowego $x_0 = 3$). W przeciwieństwie do kilku wcześniej zaprezentowanych metod, w przypadku procedury Newtona nie zawsze wraz ze wzrostem odległości punktu startowego od poszukiwanego minimum, rośnie liczba kroków potrzebnych do jego wyznaczenia. Dla każdej z badanych funkcji metoda jest zbieżna kwadratowo.

W większości rozważanych przypadków modyfikacja metody Newtona daje zbieżność do tych samych punktów (nie zawsze tym punktem jest poszukiwane minimum), co metoda Newtona. Dla funkcji f_1 zmodyfikowana metoda Newtona daje zbieżność do minimum w tej samej liczbie iteracji we wszystkich rozważanych punktach. Jednak minimum to wyznaczane jest z dużo mniejszą ilością poprawnych cyfr ułamkowych (tylko z 5, podczas gdy metoda Newtona dawała 14 cyfr poprawnych). Dla pozostałych badanych funkcji liczba kroków potrzebnych do znalezienia minimum zmodyfikowaną metodą Newtona jest albo taka sama, jak w metodzie Newtona, albo niewiele większa dla poszczególnych punktów startowych. Dla każdej z badanych funkcji metoda jest zbieżna nadliniowo.

Dla metody Halleya w każdym z rozważanych punktów startowych dla funkcji f_1 oraz f_2 minimum wyznaczone zostało z 14 poprawnymi cyframi ułamkowymi, natomiast dla funkcji f_3 ze wszystkimi poprawnymi w przyjętej precyzji obliczeń, czyli z 15. W każdym z rozważanych przypadków liczba kroków potrzebnych do wyznaczenia minimum jest mniejsza, niż w przypadku metody Newtona.

Identyczne wyniki (jeżeli chodzi o liczbę kroków) daje modyfikacja metody Halleya. Podobnie jak w przypadku modyfikacji innych metod, również zastosowanie ilorazów różnicowych w procedurze Halleya skutkuje mniejszą ilością poprawnych cyfr ułamkowych.

6. Wnioski

Z przeprowadzonych testów wynika, że dla wszystkich badanych funkcji minimum każdej z nich wyznaczone jest w najmniejszej liczbie iteracji metodą Halleya. Warto jednocześnie zwrócić uwagę na fakt, że minimum to wyznaczane jest jednocześnie bardzo precyzyjnie, tj. z 14 lub 15 poprawnymi cyframi ułamkowymi. Równie skuteczna okazuje się metoda aproksymacji kwadratowej, która także może wyznaczyć minimum funkcji z 14 poprawnymi cyframi ułamkowymi. Jednak w przypadku trudności ze skonstruowaniem w pobliżu minimum wielomianu drugiego stopnia, który dobrze by aproksymował funkcję, metoda ta może wyznaczyć minimum tylko z 1-2 poprawnymi cyframi ułamkowymi. Największym rzędem zbieżności charakteryzują się gradientowe metody: Newtona i Halleya. Również wszystkie z zaprezentowanych procedur charakteryzują się zbieżnością jedynie lokalną. Wszystkie metody zostały zastosowane dla każdej funkcji, a także punkty startowe (bądź przedziały) w każdej metodzie dla rozpatrywanej funkcji były takie same. Interesujące wydaje się zbadanie, w ilu z rozważanych przedziałów (bądź punktów startowych) dana metoda była zbieżna do minimum. Oczywiście w zależności od doboru innych punktów startowych lub też przedziałów poszukiwania minimum wyniki mogą się różnić, porównanie to pozwoli jednak odpowiedzieć na pytanie, czy dla danej metody i danej funkcji większość z badanych punktów daje zbieżność do minimum, czy tylko nieliczne. Metoda α -podziału jest zbieżna do minimum we wszystkich rozważanych punktach, metoda

Fibonacciego w 90%, Newtona w 60.7%, zmodyfikowana metoda Newtona w 58.8%, zmodyfikowana metoda Halleya w 54.9%, Halleya i Steffensena w 52.9%, aproksymacji kwadratowej w 48%, natomiast zmodyfikowana metoda Steffensena w 45% badanych punktów. Dla większości z zaprezentowanych metod wraz ze wzrostem długości przedziału, w którym poszukiwane jest minimum (lub też odległości punktu startowego od poszukiwanego minimum) zwiększa się liczba iteracji potrzebnych do jego wyznaczenia. W przypadku metody aproksymacji kwadratowej nie ma ścisłego związku między długością przedziału (lub odległością punktu startowego od poszukiwanego minimum), a liczbą iteracji. Jak zostało wspomniane wcześniej, nie zawsze możliwe jest w łatwy sposób obliczenie pochodnej danej funkcji lub też jej wyznaczenie może wymagać dużego nakładu obliczeń. Wówczas wykorzystuje się modyfikacje metod, które zamiast obliczania pochodnej wprost, wymagają zastosowania odpowiedniego ilorazu różnicowego. Podsumowując, jeżeli zależy nam na mniej precyzyjnym wyznaczeniu minimum funkcji, przy jednocześnie pewności, że znaleziony punkt jest rzeczywistym minimum, powinniśmy zastosować metodę α -podziału, bądź Fibonacciego. Jeżeli natomiast mamy pewność, że w pobliżu poszukiwanego minimum badaną funkcję da się dobrze aproksymować wielomianem drugiego stopnia, wówczas do wyznaczenia minimum można zastosować metodę aproksymacji kwadratowej. Natomiast jeżeli chcemy wyznaczyć minimum funkcji z możliwie dużą ilością poprawnych cyfr ułamkowych przy jednocześnie niewielkim nakładzie obliczeń, wówczas należy zastosować szybkozbieżną gradientową metodę Newtona, bądź Halleya. Jak zostało wspomniane wcześniej, w przypadku trudności z obliczeniem pochodnej, można zastosować modyfikacje tych metod. W przypadku stosowania metod gradientowych, aby osiągnąć zbieżność do minimum, obliczenia powinniśmy rozpocząć możliwie blisko poszukiwanego minimum. Jeżeli nie potrafimy dokładnie zlokalizować położenia minimum badanej funkcji i obliczenia rozpoczniemy na dużym przedziale, możemy zastosować pewną kombinację. Otóż obliczenia rozpoczynamy metodą α -podziału (w tym przypadku nie żądamy jednak zbyt dużej precyzji obliczeń), a następnie od pewnego punktu stosujemy szybkozbieżną metodę, np. Halleya.

7. Literatura

- [1] Bazaraa M.S., Sherali H.D., Shetty C.M.: Nonlinear Programming – Theory and Algorithms, Wiley, 1993.
- [2] Ben-Tal A., Nemirovski A.: Optimization I-II, Technion – Israel Institute of Technology, 2004
- [3] Findeisen W., Szymanowski J., Wierzbicki A.: Teoria i metody obliczeniowe optymalizacji, PWN, 1980
- [4] Kincaid D., Cheney W.: Analiza numeryczna, Wydawnictwa Naukowo Techniczne, 2005
- [5] Kręglewski T., Rogowski T., Ruszczyński A., Szymanowski J.: Metody optymalizacji w języku FORTRAN, PWN, 1984
- [6] Ostanin A.: Metody i algorytmy optymalizacji, Wydawnictwo Politechniki Białostockiej, 2003
- [7] Ostanin A.: Optymalizacja liniowa i nieliniowa, Wydawnictwo Politechniki Białostockiej, 2005
- [8] Snyman J. A.: Practical Mathematical Optimization, Springer 2005

Artykuł recenzowany