Лекции ИУ7. Методы Вычислений. Семестр 2

Власов П. А.[*]

18 февраля 2016 г.

Содержание

Основные понятия

Типовая задача оптимизации имеет следующий вид

$$\begin{cases} f\left(x\right) \to min \\ x \in G \end{cases} \tag{1}$$

Замечание:

1. Если требуется задачу максимизации, то обычно вместо функции $f(x)$ рассматривают функцию $g(x) = -f(x)$ и решают задачу минимизации для G.
2. В прошлом семестре мы рассматривали задачу (1) для:
    (a) случая, когда G конечно или счетно
    (b) случая, когда f линейна, а G — выпуклый многоугольник в пространстве $\mathbb{R}^n$. (В этом случае задачу (1) называют *задачей исследования операций*)
3. В этом семестре будем рассматривать задачу (1) для
    (a) произвольной (не обязательно скалярной) функции f и
    (b) для произвольного множества $G \subseteq \mathbb{R}^n$.

Используется следующая терминология:

[*]Законспектировано Абакумкиным А. В.

Функция f	Множество G	Название задачи
$f: G \to \mathbb{R}$	$[a;b] \subset \mathbb{R}$	Задача одномерной оптимизации
$f: G \to \mathbb{R}$	$G = \mathbb{R}^n, n \geqslant 2$	Задача многомерной безусловной оптимизации
$f: G \to \mathbb{R}$	$G \subset \mathbb{R}^n, n \geqslant 2$	Задача многомерной условной оптимизации
$f: G \to \mathbb{R}^m, m \geqslant 2$	$G \subseteq \mathbb{R}^n$	Задача многокритериальной оптимизации

1. Одномерная оптимизация

$$\begin{cases} f(x) \to min \\ x \in [a;b] \end{cases} \tag{2}$$

1.1. Основные понятия одномерной оптимизации

1.1.1. Минимум функции

Пусть $f: G \to \mathbb{R}^n, G \subseteq \mathbb{R}$

Определение: Точка $x^* \in G$ называется *точкой глобального минимума* функции f на множестве $\forall x \in G \quad f(x^*) \leqslant f(x)$.

При этом число f^* называется *минимум* (глобальным) функции f на G и обозначается $f^* = \min\limits_{x \in G} f(x)$.

Замечание: Обозначим *множество всех точек глобальных* минимумов f на G, как

$$G^* = \left\{ x^* \in G : f(x^*) = \min_{x \in G} f(x) \right\}$$

Определение: Точка $\tilde{x} \in G$ называется *точкой локального минимума* функции на множестве G, если

$$\exists \varepsilon > 0 \quad \forall x \in u_\varepsilon(\tilde{x}) \cap G \quad f(\tilde{x}) \leqslant f(x),$$

где $u_\varepsilon(\tilde{x}) = \{x : |\tilde{x} - x| < \varepsilon\}$.

Замечание:

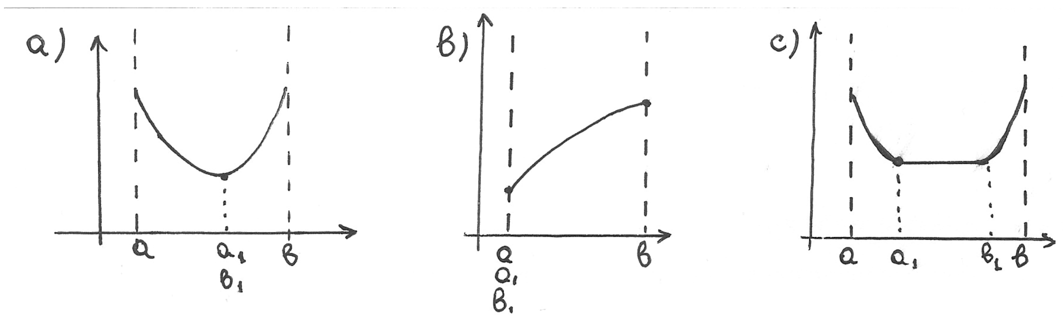
1. Точка глобального минимума является точкой локального минимума. Обратное неверное.
2. Задача (2) имеет решение тогда и только тогда, когда $G^* \neq 0$
3. Согласно теореме Вейерштрасса, всякая функция, непрерывная на замкнутом ограниченном множестве, достигает на этом множестве своих inf и sup (которые являются в этом случае минимум и максимумом этой функции на этом множестве).
   Таким образом задача (2) всегда имеет решение в случае непрерывной функции f.

1.1.2. Унимодальные функции

Пусть $f: [a;b] \to \mathbb{R}$

Определение: f называется *унимодальной* на отрезке $[a;b]$, если $\exists a_1, b_1 \in \mathbb{R}$:

1. $a \leqslant a_1 \leqslant b_1 \leqslant b$
2. Если $a < a_1$, то f монотонно убывает на $[a;a_1]$
3. Если $b_1 < b$, то f монотонно возрастает на $[b_1;b]$.
4. $\forall \tilde{x} \in [a_1;b_1] \quad f(\tilde{x}) = \min\limits_{x \in G} f(x)$



Свойства унимодальных функций

1° Каждая точка локального минимума унимодальной функции является одновременно точкой её глобального минимума.

2° Если f унимодально на $[a;b]$, то f унимодально и на любом отрезке $[a_1,b_1]\subset[a;b]$.

3° Пусть:

1. f унимодальна на отрезке $[a;b]$
2. $a\leqslant x_1<x_2\leqslant b$
3. x^*— точка минимума функции f.

Тогда

1. Если $f(x_1)\leqslant f(x_2)$, то $x^*\in[a;x_2]$
2. Если $f(x_1)>f(x_2)$, то $x^*\in[x_1;b]$

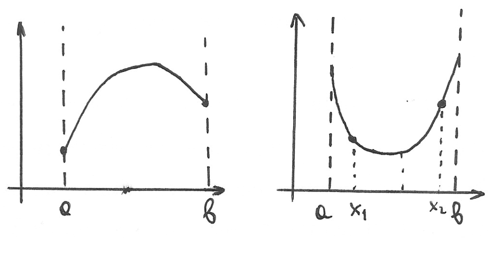
1.1.3. Выпуклые функции

Пусть $f:[a;b]\to\mathbb{R}$

Определение: Функция f называется *выпуклой,* если

$$\forall\forall x_1,x_2\in[a;b]\quad\forall\alpha\in[0;1]$$

$$f(\alpha x_1+(1-\alpha)x_2)\leqslant\alpha f(x_1)+(1-\alpha)f(x_2)\tag{3}$$



Замечание:

1. Неравенство (3) означает, что для любой хорды графика функции $f(x)$, которая соединяет точки $(x_1,f(x_1))$ и $(x_2,f(x_2))$, график функции $f(x)$ на отрезке, соединяющий x_1и x_2, лежит не выше этой хорды.
2. В классическом математическом анализе такие функции называются выпуклыми вниз. Функции, которые в классическом математическом анализе являются выпуклыми вверх, мы не будем считать выпуклыми (так как они не удовлетворяют нашему определению). Эта «дискриминация» связана с тем, что в дальнейшем будем рассматривать только задачу минимизации.

Свойства выпуклых функций

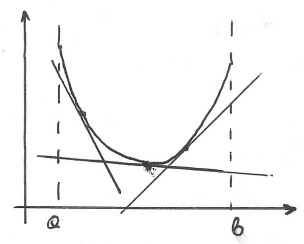
Через $C^{(k)}\left[a;b\right]$ будем обозначать функции, которые непрерывны на отрезке $[a;b]$ и имеют на $[a;b]$ непрерывные производные до порядка k включительно.

1° Пусть $f \in C^{(1)}\left[a;b\right]$

Тогда f выпукла тогда и только тогда, когда $f'\left(x\right)$ не убывает на $[a;b]$

2° Пусть $f \in C^{(2)}\left[a;b\right]$, тогда f выпукла на $[a;b] \Leftrightarrow f''\left(x\right) \geqslant 0, \quad x \in [a;b]$

3° Пусть $f \in C^{(3)}\left[a;b\right]$, тогда f выпукла $\Leftrightarrow \forall x_0 \in [a;b]$ касательная к графику функции $f\left(x\right)$ в точке x_0 лежит не выше графика $f\left(x\right)$.



4° Пусть

1. $f \in C^{(1)}\left[a;b\right]$
2. f выпукла на $[a;b]$
3. $f'\left(x^*\right) = 0, \quad x^* \in [a;b]$

Тогда x^* — точка глобального минимума $f(x)$, $x \in [a;b]$.

5° $C\left[a;b\right] = C^0\left[a;b\right]$

Пусть

1. $f \in C\left[a;b\right]$
2. f выпукло на $[a;b]$

Тогда f унимодальна на $[a;b]$

Замечание:

1. Многие методы минимизации разработанны для унимодальных функций. При этом эти методы хорошо сходятся, если f выпукла.
2. На практике проверку выпуклости целевой функции осуществляют не с помощью использования определения, а с использованием свойств 1-3 или физических соображений.

1.1.4. Липшицевы функции

Пусть $f : [a;b] \to \mathbb{R}$

Определение: Говорят, что f удовлетворяет на отрезке $[a;b]$ удовлетворяет условию Липшица (является липшицевой), если

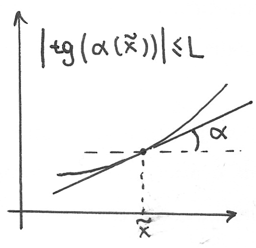
$$\exists L \geqslant 0 \quad \forall\forall x_1, x_2 \in [a;b]$$

$$\left|f\left(x_1\right) - f\left(x_2\right)\right| \leqslant L \cdot \left|x_1 - x_2\right|$$

При этом L называется константой Липшица для f на $[a;b]$.

Замечание: Для дифференцируемой на $[a;b]$ функции условие Липшица означает, что для любой точки $\tilde{x} \in [a;b]$ угловой коэффициент касательной к графику $f(x)$ в этой точке по абсолютной величине не превосходит L.

$$\forall \tilde{x} \quad |\text{tg}\alpha(\tilde{x})| \leqslant L$$



Свойства липшицевых функции

1° Если f удовлетворяет условию Липшеца с констанотой L, то f удовлетворяет условию и с любой константой $L_1 > L$.

2° Если f липшицева на $[a;b]$, то f является липшицевой и на любом отрезке $[a_1, b_1] \subseteq [a, b]$.

3° Если $f \in C^{(1)}[a;b]$, то

1. f липшицева на $[a;b]$
2. константа Липшица для f на $[a;b]$ может быть выбрана

$$L = \max_{x \in [a,b]} |f'(x)|.$$

4° Пусть

1. $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$
2. f является липшицевой на $[x_{i-1}, x_i]$ с константой L_i, $i = \overline{1;n}$.

Тогда f является липшицвой на $[x_0; x_n]$ с константой

$$L = \max_{i=\overline{1;n}} L_i.$$

5° Если f липшицева на $[a;b]$, то она непрерывна на $[a;b]$.

Пример:

1. $f(x) = \sin x$ является липшицевой на любом отрезке $[a;b]$, так как она непрерывно дифференцируема на $[a;b]$
2. $f(x) = \sqrt{x}$ не является липшицевой на $[0;a]$, $a > 0$. Если бы f была липшицевой, то угловые коэффициенты касательных к графику были бы ограничены некоторой константой. Для $\sqrt{x}$ на $[0;a]$ это не так.

1.2. Методы одномерной оптимизации

1.2.1. Классический метод

$$\begin{cases} f(x) \to min \\ x \in [a;b] \end{cases}$$

Из курса математического анализа известно:

1. Если

   (a) $f(x)$ дифференцируемая в точке x^*,

   (b) $f(x)$ имеет локальный экстремум в точке x^*,

   то $f'(x) = 0$

2. Если

   (a) $f(x)$ дифференцируемая в окрестности x^*,

   (b) $f'(x^*) = 0$,

   то

   (a) Если $f(x)$при переходе через x^* меняет знак с «$-$» на «$+$», то x^* — точка локального минимума

   (b) Если $f(x)$при переходе через x^* меняет знак с «$+$» на «$-$», то x^* — точка локального

3. Если

   (a) $f(x)$ n раз дифференцируемая в точке x^*,

   (b) $f'(x) = f^{(n-1)}(x^*) = 0$,

   (c) $f^{(n)}(x^*) \neq 0$,

   то

   (a) если n нечетно, то $f(x)$ не имеет локального экстремума в точке x^*,

   (b) если n четно, а $f^{(n)}(x^*) > 0$, то x^* — точка локального минимума,

   (c) если n четно и $f^{(n)}(x^*) < 0$, то x^* — точка локального максимума.

Классический метод

1. Вычисляем $f'(x)$, $x \in (a; b)$, решаем уравнение

$$f'(x) = 0 \tag{4}$$

   Пусть $x_1, \ldots, x_n$ — его решения

2. Для каждой точки x_k, $k = \overline{1, n}$ проверяем условие 2 или 3 и отбираем точки $\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_p$, которые отвечают условию локального минимума.

3. Полагаем

$$f^* = \min\left\{f(\tilde{x}_1), \ldots f(\tilde{x}_p), f(a), f(b)\right\}$$

Замечание: На практике для применения этого метода затруднительно по следующим причинам

1. Для практически интересных(?) функций аналитическое решение (4) часто затруднительно

2. Функция может быть известна из наблюдений, что ведет к тому, что невозможно получить аналитическое представление для $f'(x)$

3. Проверка достижимости условий затруднительна

Эти трудности привели к появлению численных методов.

Их делят

1. Прямые методы

   - методы перебора и поразрядного поиска
   - методы исключения отрезков
   - метод парабол

2. Методы использующие производные целевой функции
   - метод бисекций
   - метод хорд и Ньютона

   1 и 2 используются для унимодальных функций
3. Для минимизации многомодальных функций:
   - метод перебора
   - метод ломаных

Замечание: *Прямыми* называются методы, которы используют только значения целевой функции и не используют значения её производных.

1.2.2. Методы перебора и поразрядного поиска

Всегда предполагаем, что функция является унимодальной

I метод перебора

1. Разобьем $[a, b]$ системой точек $x_i = a + i\Delta$, $i = \overline{0, n}$, где $\Delta = \frac{b-a}{n}$
2. Затем вычислим $f(x_i)$, где $i = \overline{0, n}$
3. Выбираем точки x_m, $m \in \{0, \dots, n\}$ так, чтобы $f(x_m) = \min\limits_{i=\overline{0,n}} f(x_i)$. Положим $x^* = x_m$, $f^* = f(x_m)$

Замечание:

1. Погрешность нахождения x^* с использованием этого метода

$$\varepsilon_n \leqslant \frac{b-a}{n}$$

2. Если принять $n \gg 1$, то $\frac{1}{n} \approx \frac{1}{n+1}$ поэтому точность $\varepsilon(N)$, которую обеспечивает этот метод для N кратного вычисления(?) целевой функции

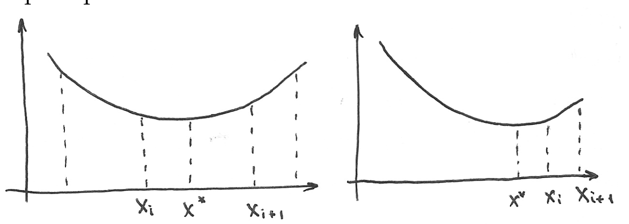
$$\varepsilon(N) \approx \frac{b-a}{N}$$

II метод поразрядного поиска

Этот метод является усовершенствованием метода перебора с целью уменьшения количества значений целевой функции f, которое необходимо найти для достижения заданной точности.

Замечание:

1. Если в методе перебора $f(x_{i+1}) \geqslant f(x_i)$, то $x^* \in [a, x_{i+1}]$ и следовательно $f(x_{i+2}), f(x_{i+3}), \dots$ можно не вычислять.
   Пример:



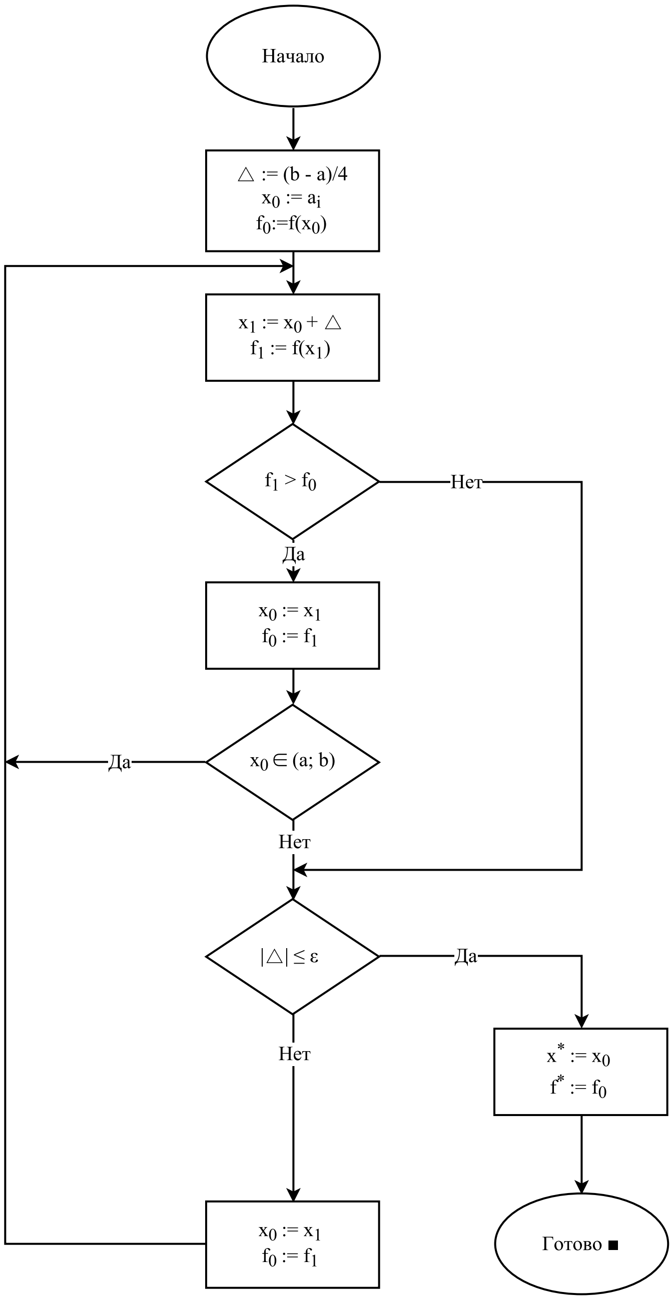
2. Целесообразно сперва найти приближенное (грубо) значение x^* , а затем уточнить это значение, используя более точный шаг.

Пусть ε — требуемая точность нахождения x^* (глобальный минимум). При реализации, обычно, сперва фиксируют $\Delta > \varepsilon$, вычисляют $f_i = f(x_i)$, $x_i = a + i\Delta$, до тех пор,пока не будет выполнено условие $f_{i+1} \geqslant f_i$.

При выполнении этого условия шаг Δ уменьшается (как правило в четыре раза, а процесс поиска запускается в обратную сторону).

Пусть ε — искомая точность.

Метод поразрядного поиска



1.2.3. Методы исключения отрезков

Один из подходов к построению основан на использовании следующих свойств. Если $x_1 < x_2$, то

1. Если $f(x_1) \leqslant f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$

2. Если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, b]$

При построении соответствующих методов выбираем две произвольные точки x_1, x_2:

$$a < x_1 < x_2 < b$$

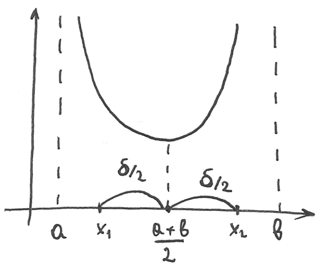
Далее проверяем условия 1-2 и по результатам этой проверки отбрасываем часть отрезка $[a, b]$.

Вычисления продолжаются до тех пор, пока длина текущего отрезка не станет меньше ε.

Пробные точки x_1, x_2 выбирают обычно симметричными от середины отрезка. Это делается для того, чтобы отношение длины нового отрезка к длине предыдущего не зависело от того, кака часть (правая или левая) отбрасывается.

Способ выбора пробных точек x_1 и x_2 определяет конкретный метод поиска минимума.

I Метод дихотомии



Выбираем достаточно малое $\delta > 0$ и положим $x_1 = \frac{a+b}{2} - \frac{\delta}{2}$, $x_2 = \frac{a+b}{2} + \frac{\delta}{2}$.

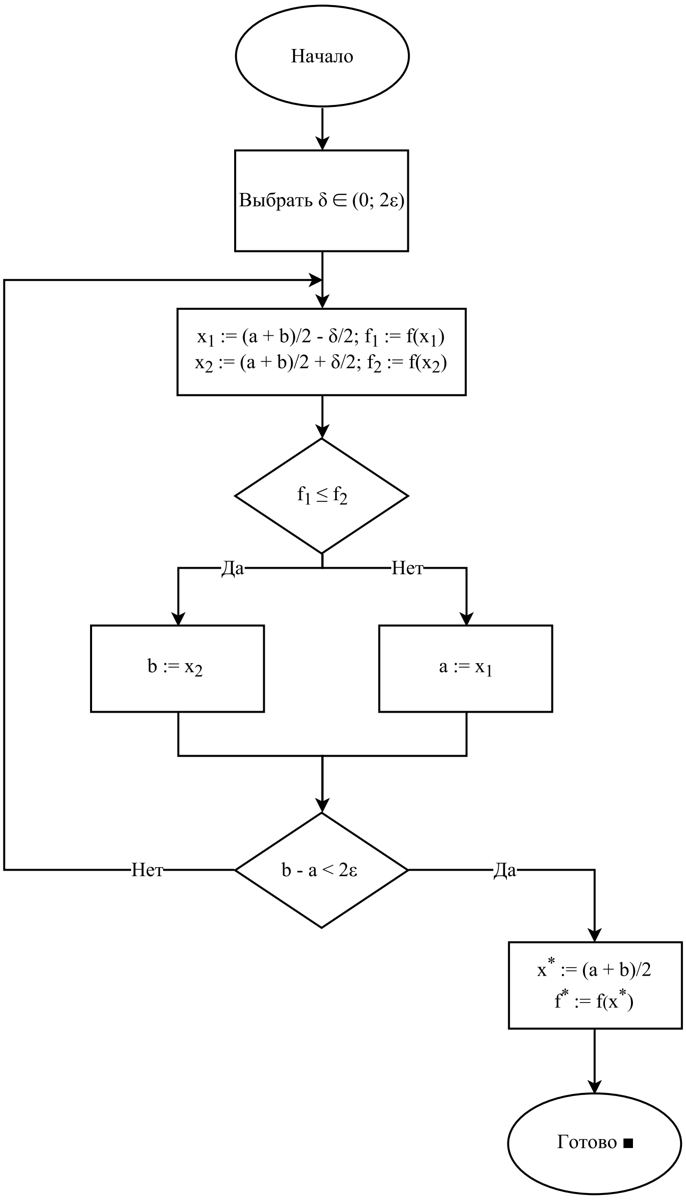
В этом случае отношение длины нового отрезка к длине предыдущего:

$$\tau = \frac{b - x_1}{b - a} = \frac{x_1 - a}{b - a} \approx \frac{1}{2}$$

Вычисления прекращаются, когда для очередного отрезка его длина

$$b - a < 2\varepsilon \tag{5}$$

Использование ослабленного неравенства (5) связано с тем, что в алгоритме принимается $x^* = \frac{a+b}{2}$



Замечание:

1. О выборе δ:

   (a) Чем меньше δ, тем метод лучше сходится

   (b) При слишком малых значениях δ значения $f(x_1) \approx f(x_2)$, если эти значения содержат ошибки измерений или вычислений, то возможно выполнение «не того» неравенства.

2. Число n итераций метода дихотомии необходимых для достижения заданной точности ε, определяется условием

$$n \geqslant \log_2 \frac{b-a-\delta}{2\varepsilon-\delta}$$