

Лекции ИУ7. Методы Вычислений. Семестр 2

Власов П. А.*

12 апреля 2016 г.

Содержание

1	Одномерная оптимизация	2
1.1	Основные понятия одномерной оптимизации	2
1.1.1	Минимум функции	2
1.1.2	Унимодальные функции	3
1.1.3	Выпуклые функции	3
1.1.4	Липшицевы функции	5
1.2	Методы одномерной оптимизации	6
1.2.1	Классический метод	6
1.2.2	Методы перебора и поразрядного поиска	7
1.2.3	Методы исключения отрезков	9
1.2.4	Метод парабол	15
1.2.5	Метод бисекции и хорд	17
1.2.6	Метод Ньютона	21
1.2.7	Метод перебора	24
1.2.8	Метод ломаных	26
2	Безусловная минимизация функций нескольких переменных	30
2.1	Основные определения	30
2.2	Выпуклые функции	33
2.3	Квадратичные функции	35
2.4	Общие принципы многомерной оптимизации	35
3	Методы безусловной минимизации ФНП	39
3.1	Метод деформируемого симплекса	39
3.1.1	Метод правильного симплекса	40
3.1.2	Метод деформируемого симплекса	41

Основные понятия

Типовая задача оптимизации имеет следующий вид

*Законспектировано Абакумкиным А. В.

$$\begin{cases} f(x) \rightarrow \min \\ x \in G \end{cases} \quad (1)$$

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:
 - (а) случая, когда G конечно или счетно
 - (б) 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
 - (а) произвольной (не обязательно скалярной) функции f и
 - (б) для произвольного множества $G \subseteq \mathbb{R}^n$.

Используется следующая терминология:

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

1. Одномерная оптимизация

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

1.1. Основные понятия одномерной оптимизации

1.1.1. Минимум функции

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

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

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

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

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

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 $G^* \neq \emptyset$

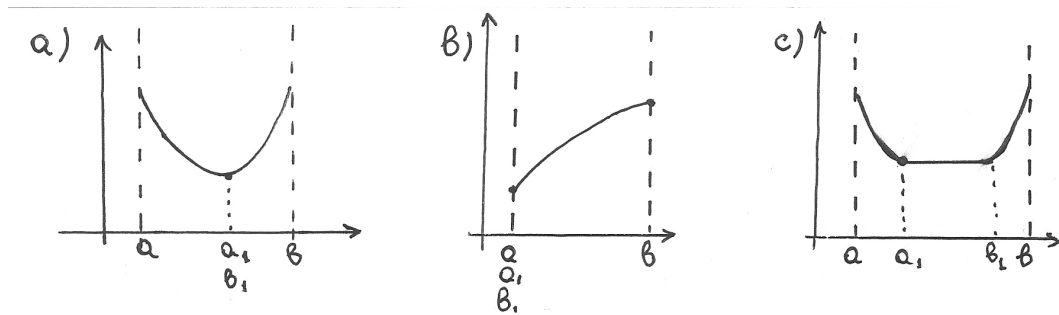
3. Согласно теореме Вейерштрасса, всякая функция, непрерывная на замкнутом ограниченном множестве, достигает на этом множестве своих \inf и \sup (которые являются в этом случае минимум и максимумом этой функции на этом множестве).
Таким образом задача (2) всегда имеет решение в случае непрерывной функции f .

1.1.2. Унимодальные функции

Пусть $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$

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

1. $a \leq a_1 \leq b_1 \leq b$
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. $\forall \tilde{x} \in [a_1; b_1] \quad f(\tilde{x}) = \min_{x \in G} f(x)$



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. $a \leq x_1 < x_2 \leq b$
3. x^* — точка минимума функции f .

Тогда

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

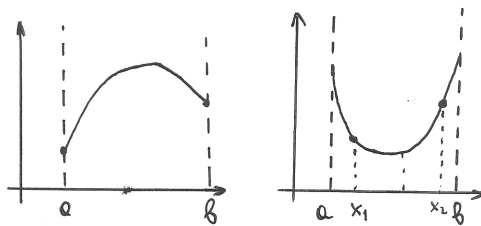
1.1.3. Выпуклые функции

Пусть $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$

Определение: Функция f называется *выпуклой*, если

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

$$f(\alpha x_1 + (1 - \alpha) x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1 - \alpha) f(x_2) \quad (3)$$



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_1 и 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

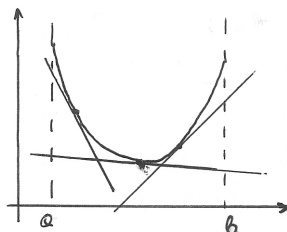
Через $C^{(k)}[a; b]$ будем обозначать функции, которые непрерывны на отрезке $[a; b]$ и имеют на $[a; b]$ непрерывные производные до порядка k включительно.

1° Пусть $f \in C^{(1)}[a; b]$

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

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

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



4° Пусть

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

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

5° $C[a; b] = C^0[a; b]$

Пусть

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

Тогда f унимодальна на $[a; b]$

Замечание:

1. Многие методы минимизации разработаны 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 $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$

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

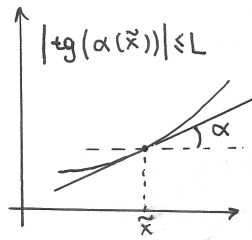
$$\exists L \geq 0 \quad \forall x_1, x_2 \in [a; b]$$

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L \cdot |x_1 - x_2|$$

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 .

$$\forall \tilde{x} \quad |\operatorname{tg} \alpha(\tilde{x})| \leq L$$



Свойства липшицевых функции

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

Тогда f является липшицевой 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

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

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, \dots, x_n — его решения

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

3. Полагаем

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

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, которые 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 $f(x_m) = \min_{i=\overline{0, n}} f(x_i)$. Положим $x^* = x_m$, $f^* = f(x_m)$

Замечание:

1. Погрешность нахождения x^* с использованием этого метода

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

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

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

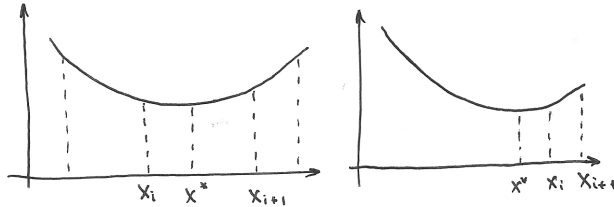
II метод поразрядного поиска

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 $f(x_{i+1}) \geq f(x_i)$, то $x^* \in [a, x_{i+1}]$ и следовательно $f(x_{i+2}), f(x_{i+3}), \dots$ можно не вычислять.

Пример:



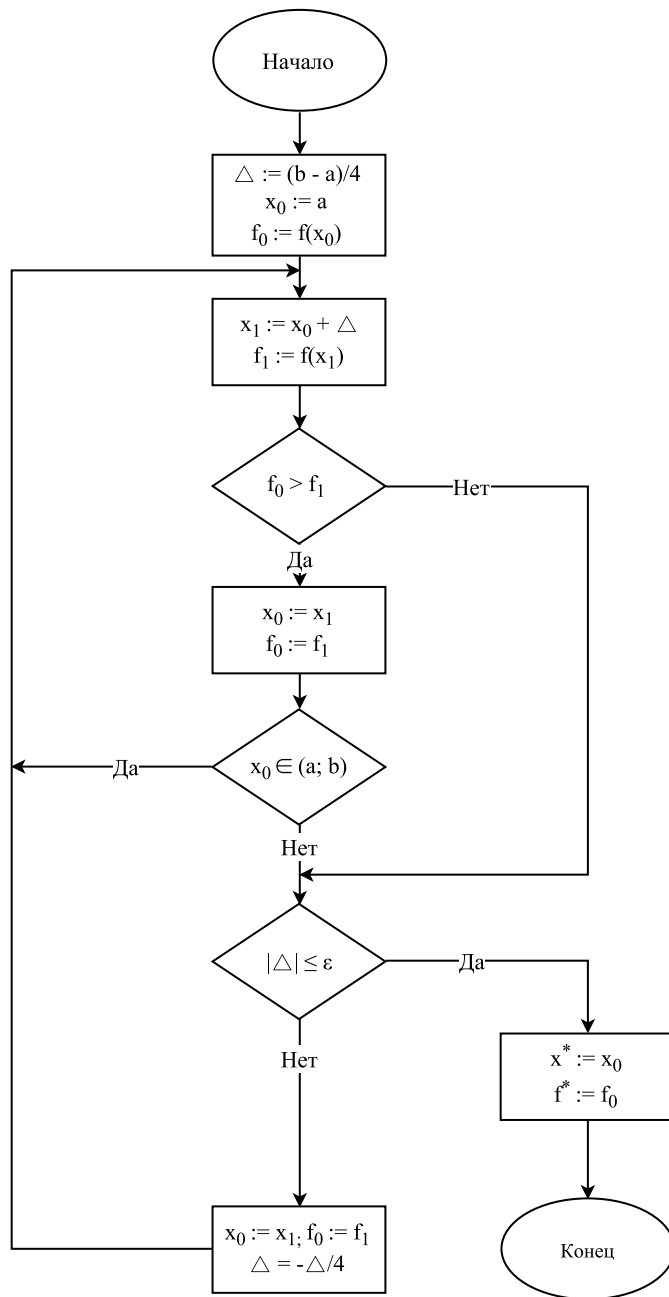
2. Целесообразно сперва найти приближенное (грубо) значение x^* , а затем уточнить это значение, используя более точный шаг.

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 $f_{i+1} \geq f_i$.

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 $f(x_1) \leq f(x_2)$, 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 :

$$a < x_1 < x_2 < b$$

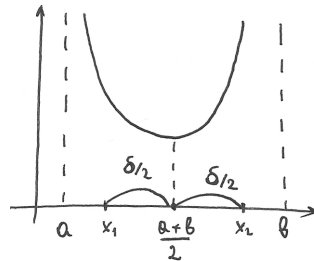
Далее проверяем условия 1-2 и по результатам этой проверки отбрасываем часть отрезка $[a, b]$.

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, какая 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 $x_1 = \frac{a+b}{2} - \frac{\delta}{2}$, $x_2 = \frac{a+b}{2} + \frac{\delta}{2}$.

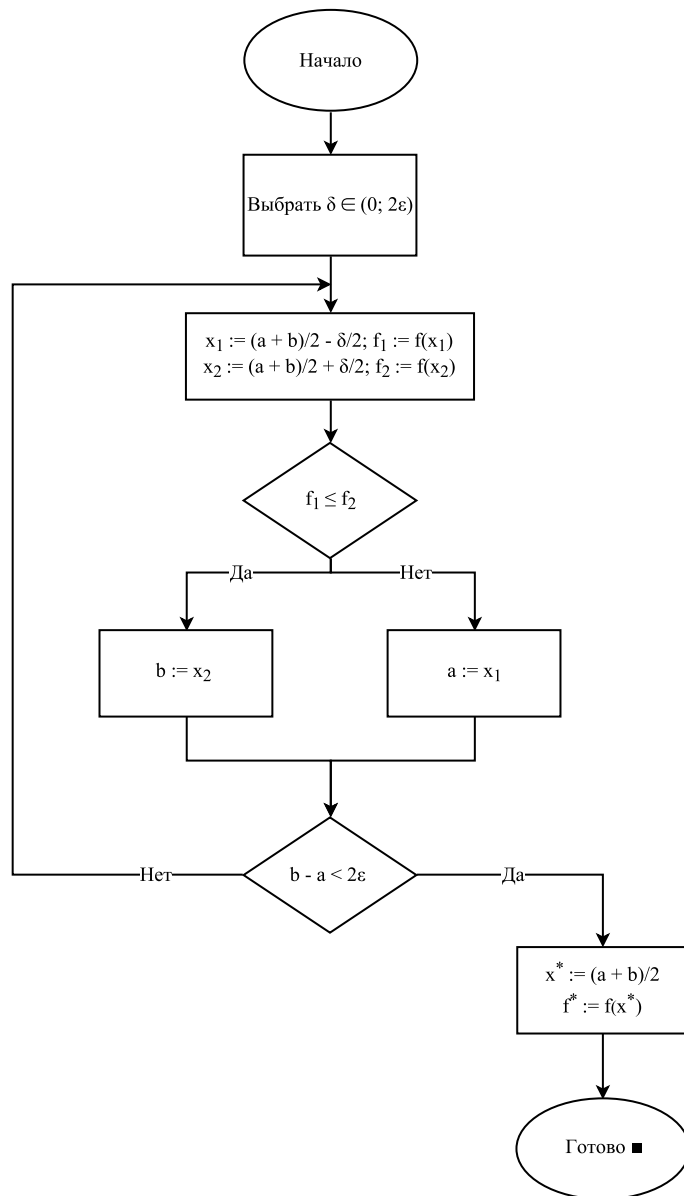
В этом случае отношение длины нового отрезка к длине предыдущего:

$$\tau = \frac{b - x_1}{b - a} = \frac{x_2 - a}{b - a} \approx \frac{1}{2}$$

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 :

- (а) Чем меньше δ , тем метод лучше сходится
- (б) 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 необходимое для достижения заданной точности ε , определяется условием

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

Доказательство

Пусть $\Delta_0 = b - a$ — длина искомого отрезка. Тогда длина искомого отрезка после первой итерации метода:

$$\Delta_1 = \frac{\Delta_0}{2} + \frac{\delta}{2}$$

Длина отрезка после второй итерации:

$$\Delta_2 = \frac{\Delta_1}{2} + \frac{\delta}{2} = \frac{\Delta_0}{4} + \delta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \right)$$

Длина отрезка после третьей итерации:

$$\Delta_3 = \frac{\Delta_2}{2} + \frac{\delta}{2} = \frac{\Delta_0}{8} + \delta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} \right)$$

...

После n итераций:

$$\Delta_n = \frac{\Delta_0}{2^n} + \delta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \dots + \frac{1}{2^n} \right) = \frac{\Delta_0}{2^n} + \delta \left(1 - \frac{1}{2^n} \right)$$

Условие окончания: $\Delta_n \leq 2\varepsilon$

Тогда

$$\frac{b-a-\delta}{2^n} + \delta \leq 2\varepsilon$$

$$\frac{b-a-\delta}{2^n} \leq 2\varepsilon - \delta$$

$$2^n \geq \frac{b-a-\delta}{2\varepsilon-\delta}$$

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

3. Так как δ обычно выбирают достаточно малым, то точность ε_n , которая обеспечивается после выполнения n итераций алгоритма,

$$n \approx \log_2 \frac{b-a-\delta}{2\varepsilon_n} \Rightarrow \varepsilon_n \approx \frac{b-a}{2^{n+1}}$$

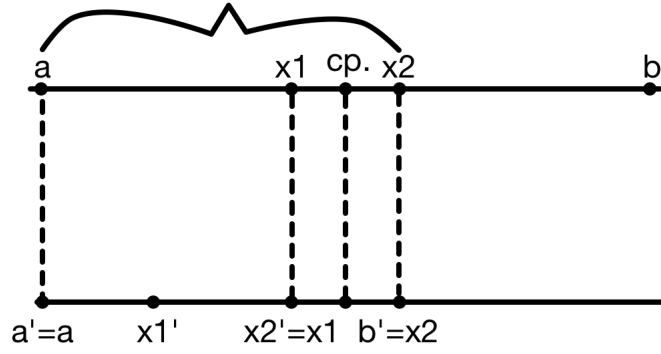
Поскольку для выполнения n итераций алгоритма требуется $N = 2n$ вычислений значений целевой функции f , то точность $\varepsilon(N)$, которая будет гарантированно после N вычислений значений функции

$$\varepsilon(N) = \varepsilon_{\frac{N}{2}} = \frac{b-a}{2^{N/2+1}}$$

II Метод золотого сечения

Для уменьшения количества значений целевой функции, которые приходится вычислять в ходе реализации алгоритма постараемся выбрать пробные точки x_1 и x_2 внутри отрезка $[a; b]$ так, чтобы при переходе к очередному отрезку одна из этих точек стала новой пробной точкой.

При этом будем считать, что отношение длины нового отрезка к длине текущего отрезка не зависит от номера итерации и равно τ . Так же будем считать, что x_1 и x_2 располагаются симметрично относительно середины отрезка $[a; b]$.



$$\tau = \frac{b' - a'}{b - a}$$

1.

$$x_2 = a + \tau(b - a)$$

$$x_1 = b - \tau(b - a)$$

2. Отношение длины отрезка $[a', x_2']$ к длине отрезка $[a', b']$ должны быть равны τ :

$$\text{Дл}([a', x_2']) = \text{Дл}([a, x_1]) = x_1 - a = b - a - \tau(b - a)$$

$$\text{Дл}([a', b']) = \text{Дл}([a, x_2]) = x_2 - a = \tau(b - a)$$

Таким образом

$$\frac{b - a - \tau(b - a)}{\tau(b - a)} = \tau \Rightarrow \frac{1 - \tau}{\tau} = \tau \Rightarrow \tau^2 + \tau - 1 = 0$$

$$\tau = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4}}{2} = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} \approx 0.6183$$

отрицательное решение не рассматриваем.

Таким образом

$$\tau = 0.6183$$

$$x_1 = b - \tau(b - a)$$

$$x_2 = a + \tau(b - a)$$

Замечание:

1. Каждая из точек x_1 и x_2 , используемых в рассматриваемом методе, делит отрезок $[a; b]$ на неравные части так, что

$$\frac{\text{длина отрезка } [a; b]}{\text{длина большей части отрезка } [a; b]} = \frac{\text{длина большей части отрезка } [a; b]}{\text{длина меньшей части отрезка } [a; b]}$$

Про такие точки говорят, что они реализуют золотое сечение отрезка $[a; b]$.

2. На каждой итерации длина отрезка уменьшается в $\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ раз. Поэтому после n итераций длина соответствующего отрезка равна

$$\frac{1}{2}\tau^n(b - a)$$

так как в конце берем $x^* = \frac{a+b}{2}$

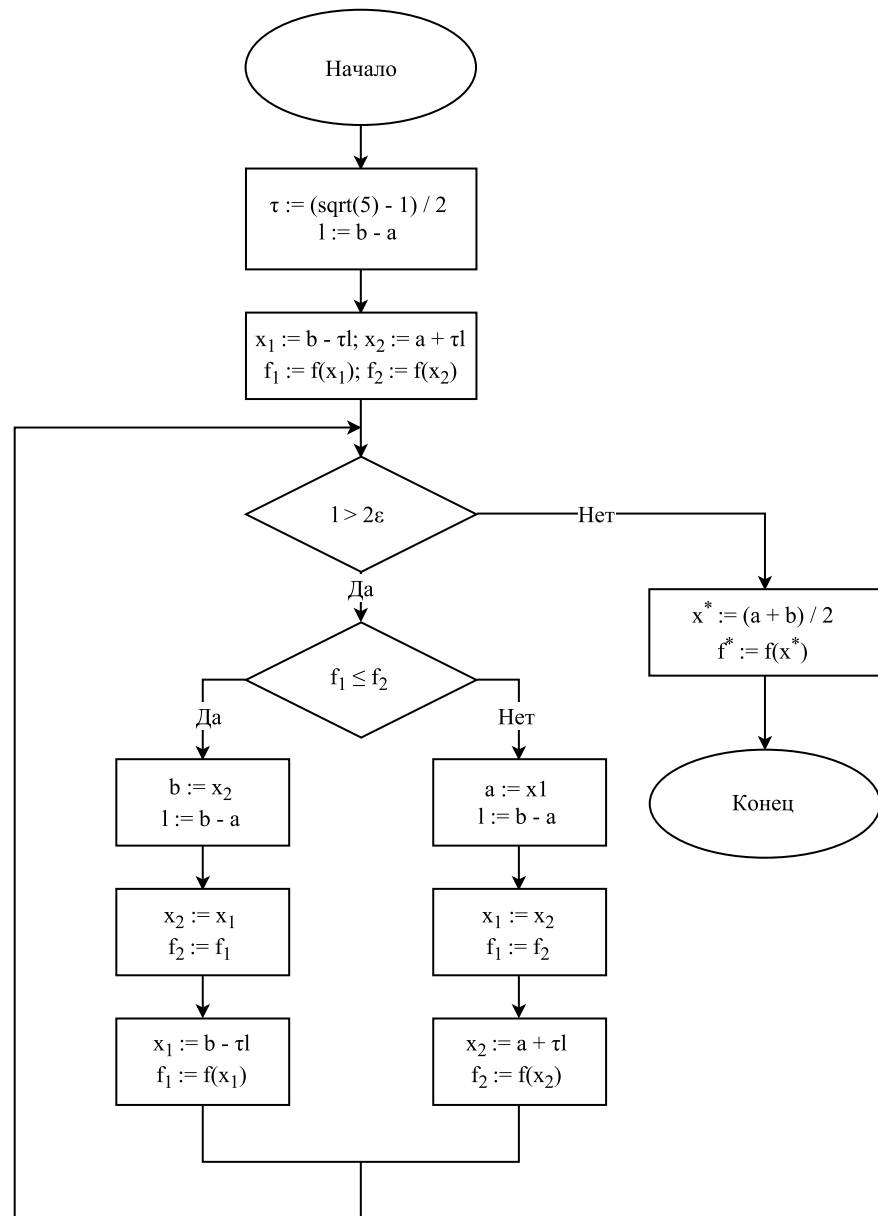
3. Число n итераций, необходимых для достижения заданной точности ε , составляет

$$\frac{1}{2}\tau^n(b - a) \leq \varepsilon \Rightarrow \tau^n \leq \frac{2\varepsilon}{b - a} \Rightarrow$$

$$n \geq \log_{\tau} \frac{2\varepsilon}{b - a} = \frac{\ln \frac{2\varepsilon}{b - a}}{\ln \tau} \approx -2.1 \cdot \ln \frac{2\varepsilon}{b - a} = 2.1 \ln \frac{b - a}{2\varepsilon}$$

4. Для выполнения первой итерации необходимо вычисление двух значений целевой функции f . Для выполнения второй, третьей, ... итераций необходимо вычисление одного значения функции. Поэтому для выполнения n итераций необходимо вычислить $N + 1$ значений функции. Поэтому

$$\varepsilon(N) = \varepsilon_n \Big|_{n=N-1} = \frac{1}{2} \tau^{N-1} (b-a) \approx \tau^{N-2} (b-a)$$



1.2.4. Метод парабол

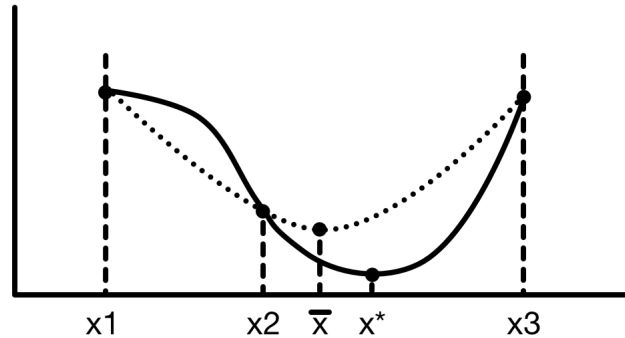
Метод парабол является представителем группы методов, основанных на аппроксимации целевой функции некоторой более простой функцией (как правило полиномом), минимум которой можно легко найти. Точка минимума этой аппроксимирующей функции и принимается за очередное приближение точки минимума целевой функции.

Пусть

1. f унимодальна на $[a; b]$
2. f достигает минимума во внутренней точке отрезка $[a; b]$

Выберем три точки $x_1, x_2, x_3 \in [a; b]$, так чтобы (*):

1. $x_1 < x_2 < x_3$
2. $f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3)$ принимает по крайней мере одно неравенство строгое



Тогда в силу унимодальности функции f точка минимума $x^* \in [x_1, x_3]$.

Аппроксимируем целевую функцию параболой, проходящей через точки (x_1, f_1) , (x_2, f_2) , (x_3, f_3) , где $f_i = f(x_i)$, $i = \overline{1; 3}$.

В силу условий (*) ветви параболы направлены вверх. Это значит, что точка \bar{x} минимума этой параболы также принадлежит отрезку $[x_1, x_3]$.

Точка \bar{x} принимается за очередное приближение точки x^* .

Пусть $q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$ — уравнение параболы.

Можно показать, что условия $q(x_i) = f_i$, $i = \overline{1; 3}$, приводят к (**):

$$\begin{aligned} a_0 &= f_1 \\ a_1 &= \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \\ a_2 &= \frac{1}{x_3 - x_2} \left[\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right] \\ \bar{x} &= \frac{1}{2} \left[x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right] \end{aligned}$$

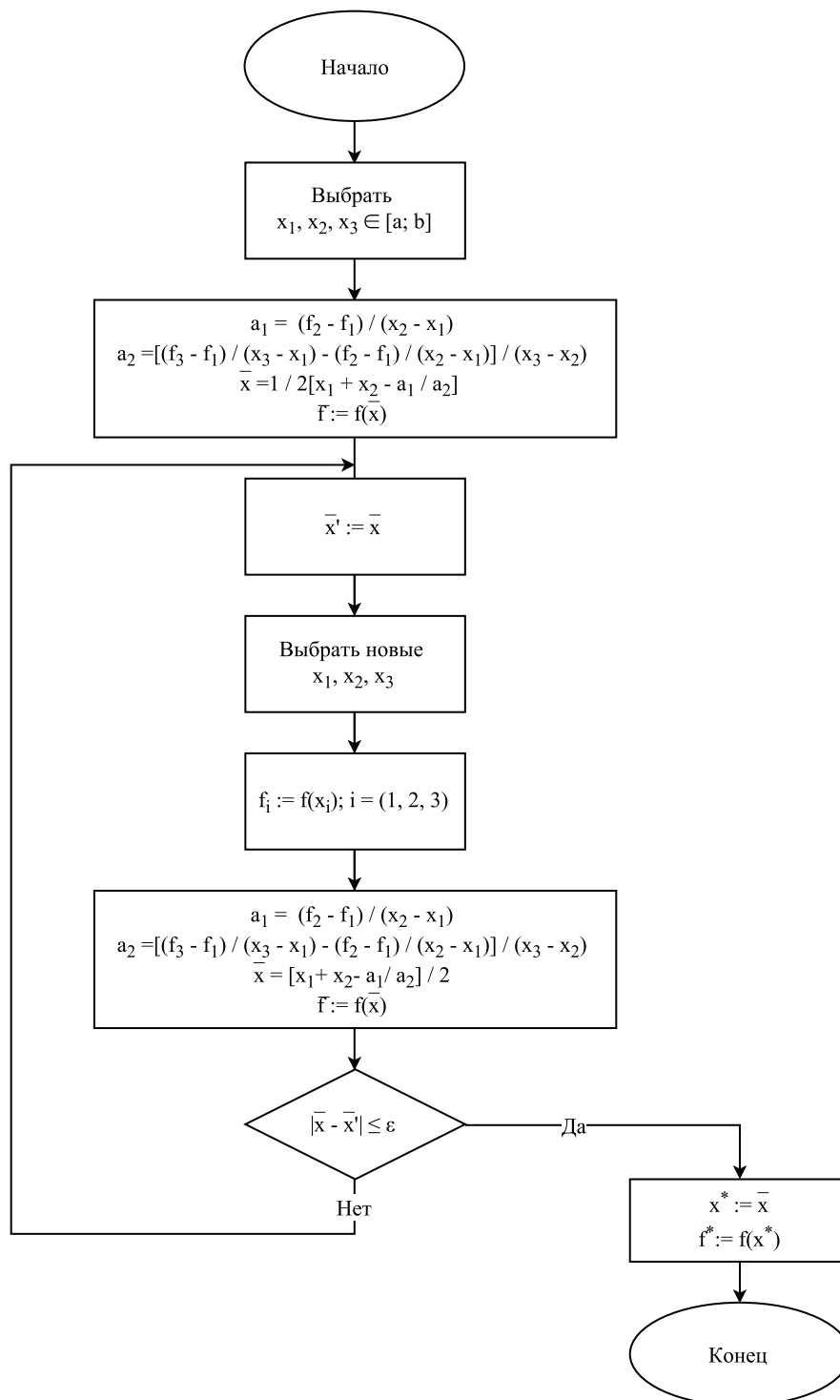
Метод парабол

Замечание:

1. В качестве критерия окончания вычислений используется условие $|\bar{x} - \bar{x}'| < \varepsilon$, означающее близость друг к другу двух последовательных приближений точки x^* . Вообще говоря, выполнение этого условия не гарантирует близость этих точек к x^* . Однако на практике такое условие удовлетворительно работает. Дополнительно точность текущего приближения можно оценивать (если получится) с использованием длины отрезка $[x_1, x_3]$.

2. О выборе точек x_1, x_2, x_3

- (a) На первой итерации для выбора точек x_1, x_2, x_3 обычно достаточно использование нескольких пробных точек. Если это не получается за разумное время, можно выполнить несколько итераций метода золотого сечения до тех пор, пока пробные точки этого метода и одна из граничных точек текущего отрезка не будут удовлетворять условиям (*).
 - (b) На второй и последующих итерациях на отрезке $[x_1, x_3]$ рассматриваются две пробные точки x_2 и \bar{x} , для которых используется метод исключения отрезков. В новом отрезке $[x'_1, x'_3]$ в качестве x'_2 выбирается та точка из x_2 и \bar{x} , которая оказалась внутри.
3. На каждой итерации метода парабол, кроме первой, вычисляется только одно значение целевой функции: \bar{f} .



1.2.5. Метод бисекции и хорд

Согласно сформулированным в п. 1 свойствам для дифференцируемой выпуклой (а значит и унимодальной) функции f условие:

$$f'(x) = 0$$

является не только необходимым, но и достаточным условием точки минимума.

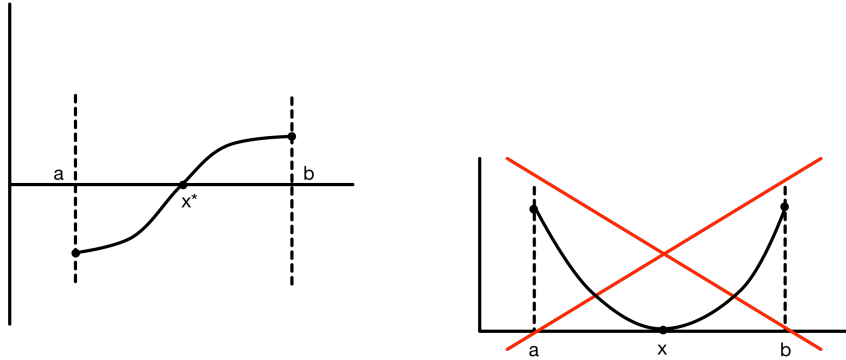
Метод бисекции поиска минимума функции $f(x)$

Является методом решения уравнения $f'(x) = 0$.

Замечание: Метод бисекции решения уравнения $g(x) = 0$

Пусть

1. $g(x)$ имеет единственный корень на $[a; b]$
2. $g(a)g(b) < 0$



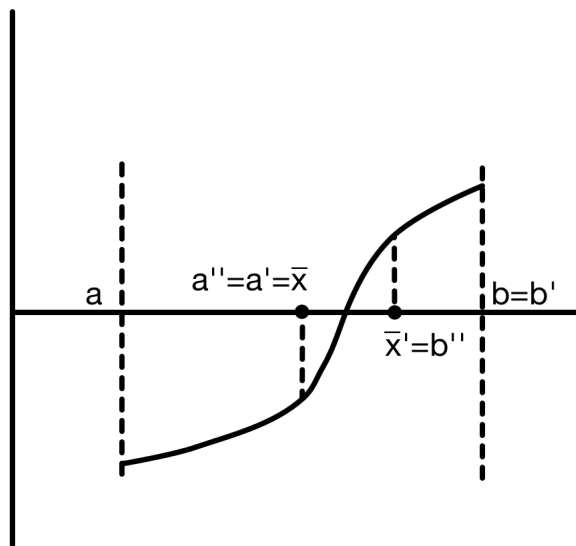
В качестве очередного приближения корня x^* в методе бисекции принимают значение

$$\bar{x} = \frac{a+b}{2}$$

Далее:

если $g(\bar{x})g(a) < 0 \Rightarrow b := \bar{x}$;

если $g(\bar{x})g(a) > 0 \Rightarrow a := \bar{x}$.



Вычисления останавливают, когда

$$|b-a| < 2\varepsilon$$

и полагают

$$x^* = \frac{x + b}{2}$$

Конец замечания

Метод бисекции решения задачи

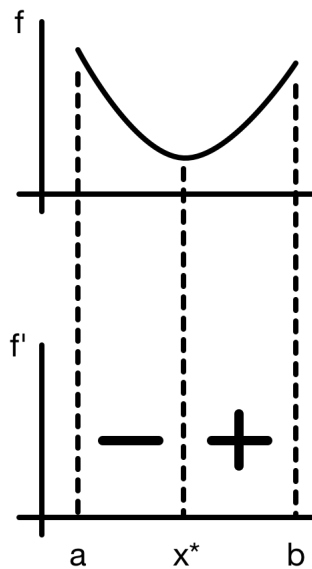
$$\begin{cases} f(x) \rightarrow \min \\ x \in [a; b] \end{cases}$$

< !!! БЛОК СХЕМА >

Замечание:

1. Так как мы используем метод бисекции для минимизации именно выпуклой функции, то

$$\begin{cases} f'(a) < 0 \\ f'(b) > 0 \end{cases}$$



2. На каждой итерации отрезок уменьшается вдвое, следовательно после n итераций будет достигнута точность

$$\varepsilon_n = \frac{b - a}{2^{n+1}}$$

Для достижения заданной точности ε необходимо сделать определенное число шагов, которое можно посчитать заранее:

$$n \geq \log_2 \frac{(b - a)}{\varepsilon} - 1$$

Метод хорд

Метод хорд решения задачи минимизации

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

является методом хорд решения уравнения $f'(x) = 0$

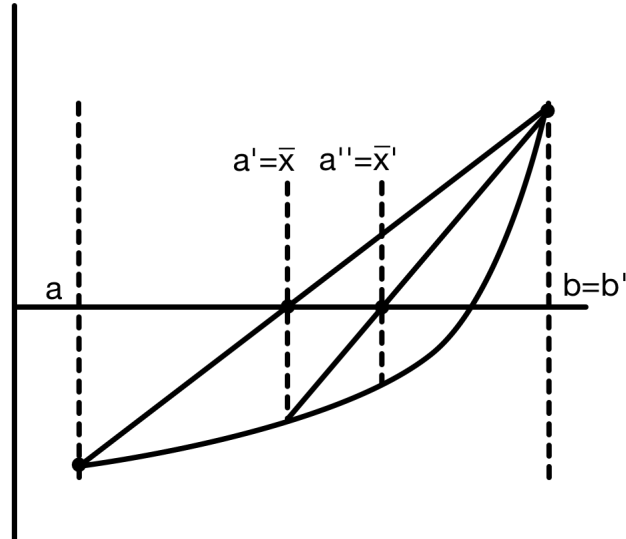
Замечание: Метод хорд решения уравнения $g(x) = 0$.

В методе хорд предполагается, что

1. $g(x)$ имеет единственный корень на $[a; b]$,

$$2. \ g(a)g(b) < 0.$$

В качестве очередного приближения \bar{x} корня x^* используется точка пересечения с осью Ox хорды, соединяющей точки $(a, g(a))$, $(b, g(b))$.



В качестве условия окончания вычислений используется

либо $|\bar{x} - \bar{x}'| \leq \varepsilon$, где \bar{x}' — приближение x^* с предыдущей итерации

либо $|g(\bar{x})| < \varepsilon$

Получим расчетное соотношение метода хорд.

$$\begin{aligned} (a, g(a)) \\ (b, g(b)) \end{aligned}$$

Уравнение хорды:

$$\frac{x - a}{b - a} = \frac{y - g(a)}{g(b) - g(a)}$$

Пересечение с Ox :

$$\begin{aligned} y = 0 \\ x = \frac{b - a}{g(b) - g(a)} \cdot (-g(a)) + a \end{aligned}$$

Метод хорд

Решение задачи

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

< !!! БЛОК СХЕМА >

Замечание: На каждой итерации, кроме первой, необходимо вычислять только одно значение функции $f'(\bar{x})$.

1.2.6. Метод Ньютона

Пусть

1. $f \in C^2[a; b]$
2. $f''(x) > 0$

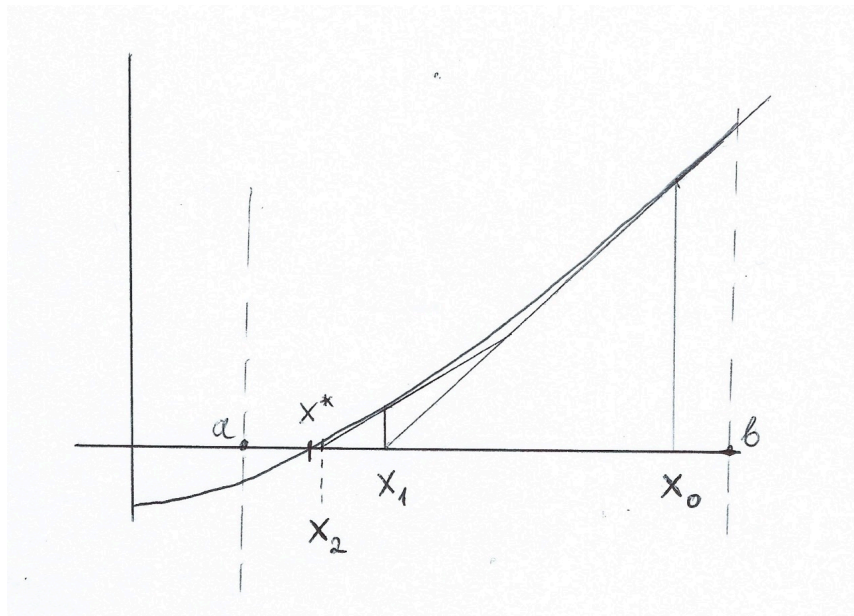
Из условия 2 вытекает, что f выпукла на $[a; b]$. Совместно с условием 1 это значит, что f унимодальна.

Метод Ньютона поиска минимума функции $f(x)$ является метод касательных (Ньютона) решения уравнения $f'(x) = 0$.

Замечание: Метод касательных решения $g(x) = 0$.

Пусть $g'(x)$ имеет постоянный знак на $[a; b]$,

В качестве очередного приближения неизвестного корня x^* используется точка \bar{x} пересечения касательной к графику функции $g(x)$ в точке \bar{x}' , где x' — текущее приближение известного корня.

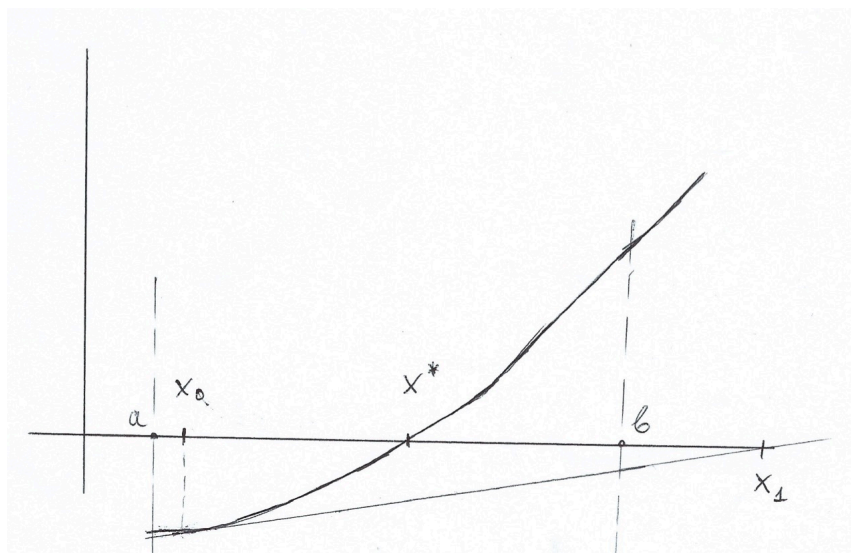


Условием окончания итераций служит:

либо $|\bar{x}' - \bar{x}| \leq \varepsilon,$

либо $|g(\bar{x})| \leq \varepsilon.$

Замечание: Метод Ньютона обладает высокой точностью и скоростью сходимости, только в том случае, когда начальное приближение x_0 достаточно близко к x^* . В случае неудачного выбора x_0 метод может расходиться. Как правило, чем больше значения функции $g'(x)$ в окрестности x^* , тем лучше сходится метод.



Расчетные соотношения метода Ньютона:

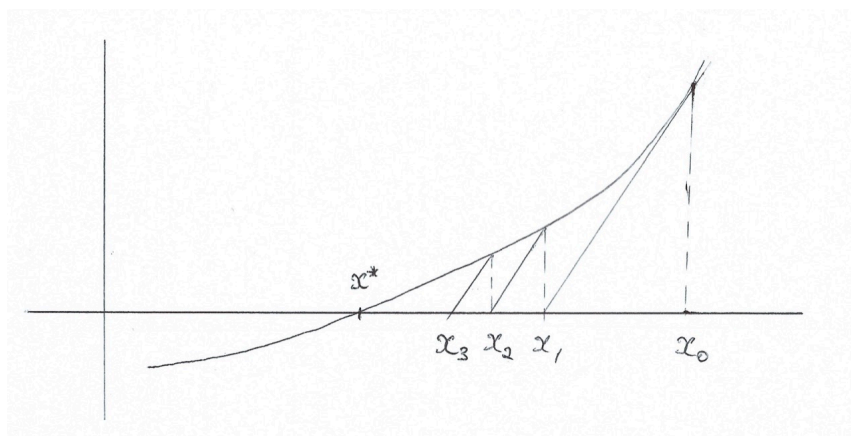
1. Уравнение касательной в точке \bar{x}' :

$$y = g'(\bar{x}') \cdot (x - \bar{x}') + g(\bar{x}')$$

2. Пересечение с Ox

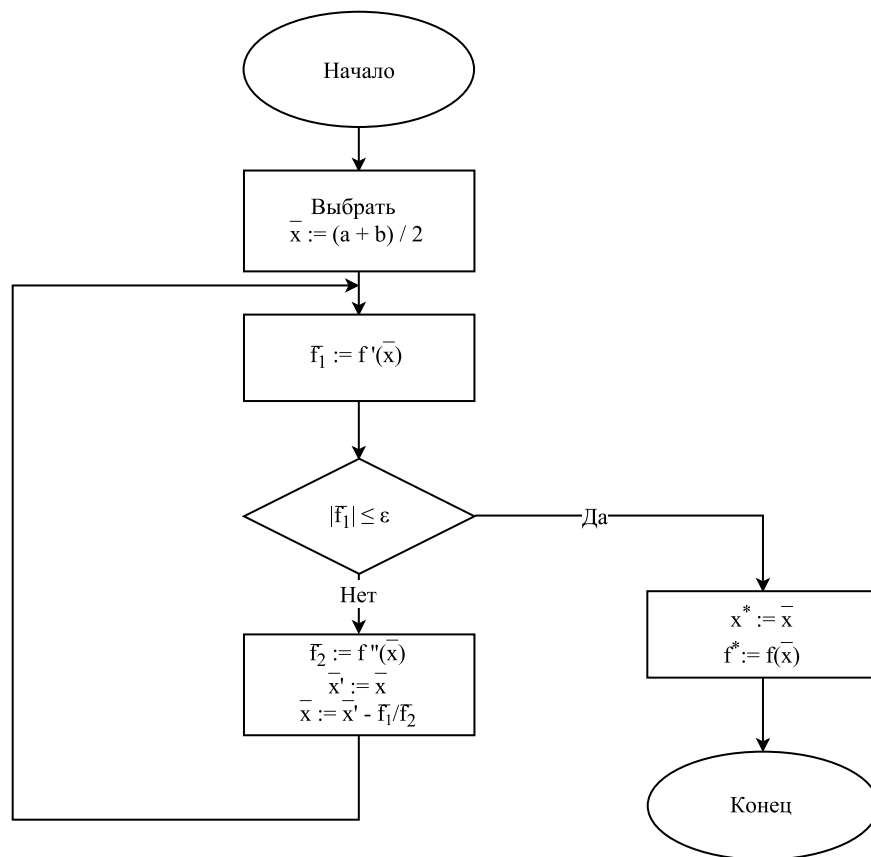
Замечание: Иногда, когда вычисление $g'(x)$ очень трудоемко, используют модификацию метода Ньютона, которая называется «Методом одной касательной».

В качестве очередного приближения \bar{x} неизвестного корня x^* используют точку пересечения Ox прямой, проходящей через точку $(\bar{x}', g(\bar{x}'))$, где \bar{x}' — текущее приближение, параллельно касательной к графику $g(x)$ в точке x_0 , x_0 — начальное приближение.



Метод Ньютона решения задачи

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



Замечание:

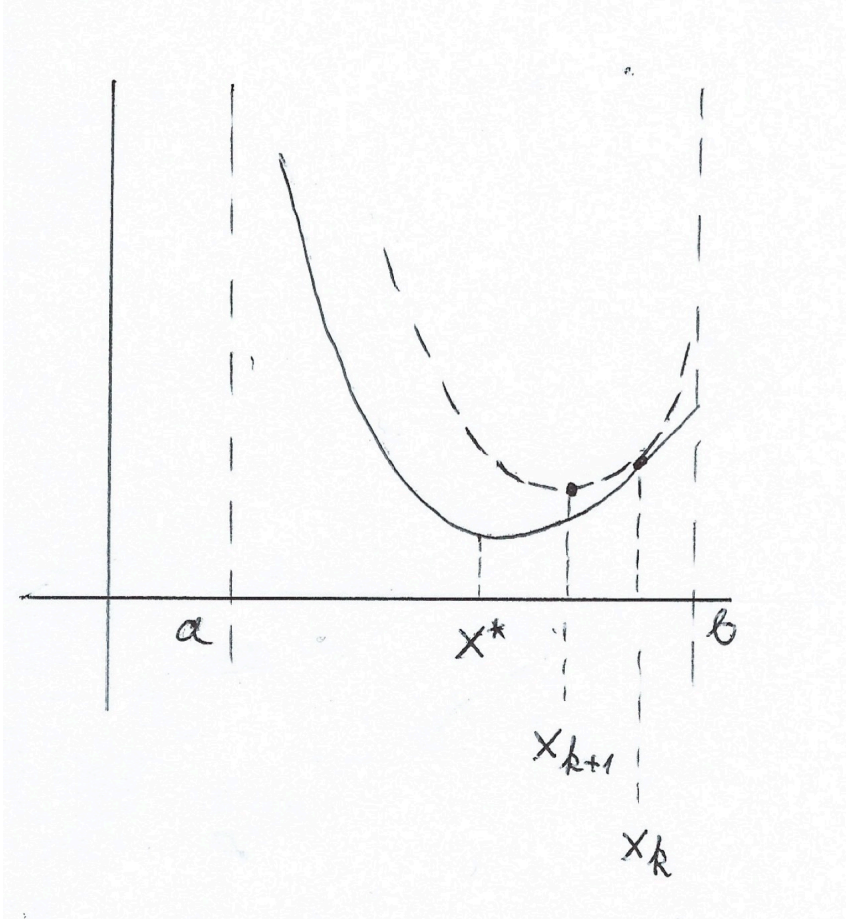
1. Формулу $x_{k+1} := x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$, с помощью которой вычисляется очередное приближение точки x^* , так же можно получить из следующих соображений. Рассмотрим квадратный трехчлен.

$$q(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}f''(x_k)(x - x_k)^2$$

Точка минимума трехчлена $q(x)$:

$$\bar{x} = x_k + \left(-\frac{b}{2a} \right) = x_k + \frac{-f'(x_k)}{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot f''(x_k)} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

Так как функция f выпукла и дважды дифференцируемая то её график в окрестности точки x_k «похожа» на параболу и, следовательно, парабола хорошо аппроксимирует f . Поэтому точка x_{k+1} минимума функции $q(x)$ близка к точке x^* функции $f(x)$, если x_k выбрана удачно.



- Можно показать, что погрешность k -ой итерации метода Ньютона

$$|x_{k+1} - x^*| \leq C \cdot q^{2^k},$$

где $C > 0$, $q \in (0; 1)$, но только в случае, если начальные x_0 выбраны удачно. Константы C , q зависят от f и от выбора x_0 .

- Если метод Ньютона расходится, то можно выполнить несколько некоторых итераций какого-нибудь другого метода, например метода золотого сечения.

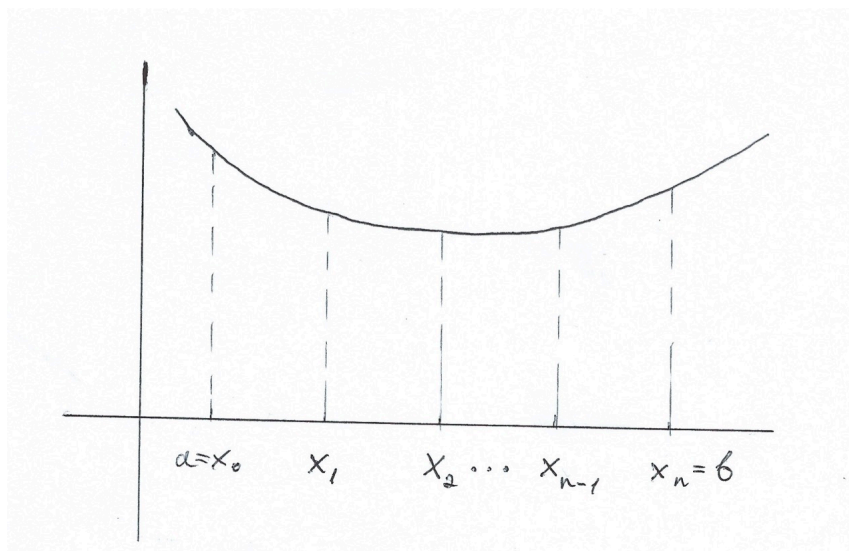
1.2.7. Метод перебора

Метод был описан выше. Отрезок $[a; b]$ разбивается на n равных частей $n + 1$ точками:

$$\begin{aligned} x_i &= a + i\Delta; & i &= \overline{0; n} \\ \Delta &= \frac{b - a}{n} \end{aligned}$$

В качестве точки x^* принимается точка x_m , для которой

$$f(x_m) = \min_{i=\overline{0; n}} \{f(x_i)\}$$



Ранее была доказана сходимость этого метода для унимодальных на $[a; b]$ функций.

Оказывается этот метод сходится и для многомодальных функций, если дополнительно потребовать липшицевость целевой функции.

Теорема: Пусть

1. Функция f удовлетворяет на отрезке $[a; b]$ условию Липшица с константой L
2. $x^* := x_m$ — точка минимума, найденная методом перебора
3. $f^* := f(x^*)$

Тогда

$$\delta_n \leq L \cdot \frac{b-a}{2n},$$

где n — число отрезков разбиения $[a; b]$, $\delta_n = |f^* - f_{\text{точн}}^*|$.

□

1. Так как f непрерывна на отрезке $[a; b]$, то f достигает на $[a; b]$ своей точки минимума (?), тогда $\exists \min_{x \in [a; b]} f(x) = f_{\text{точн}}^*$
2. Пусть x^* — точка глобального минимума $f(x)$ на $[a; b]$

Очевидно, что среди точек x_i , $i = \overline{0; n}$, найдется точка x_k такая, что

$$|x_k - x_{\text{точн}}^*| \leq \frac{\Delta}{2} = \frac{b-a}{2n}$$

Тогда

$$0 \leq f(x_m) - f_{\text{точн}}^* \leq f(x_k) - f_{\text{точн}}^* \leq L \cdot |x_k - x_{\text{точн}}^*| \leq L \cdot \frac{b-a}{2n}$$

Ввиду того, что $f(x_k) \geq f(x_m)$

■

Замечание:

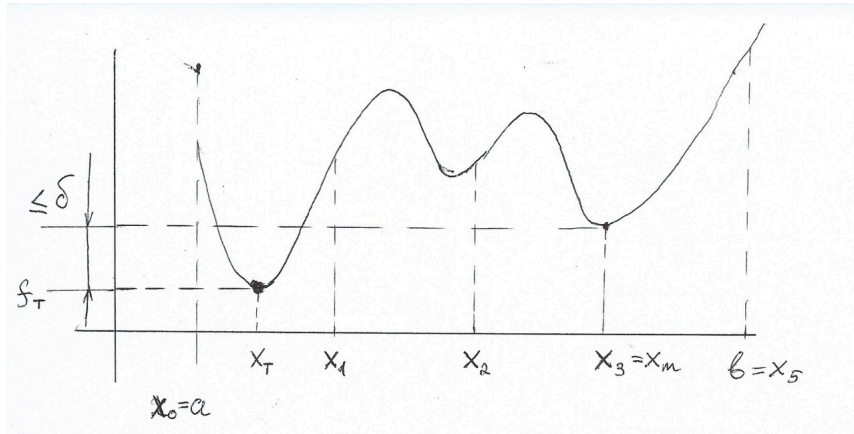
1. Из доказанной теоремы вытекает, что вычисления n значений целевой функции гарантирует точность

$$\delta(N) \leq L \cdot \frac{(b-a)}{2(N-1)}$$

2. Для обеспечения заданной точности δ необходимо вычислить

$$N \geq \frac{L(b-a)}{2\delta} + 1$$

3. Может получиться так, что значение f^* найдено с заданной точностью δ , но точка минимума $x^* = x_m$ далека от $x_{\text{точн}}$



1.2.8. Метод ломаных

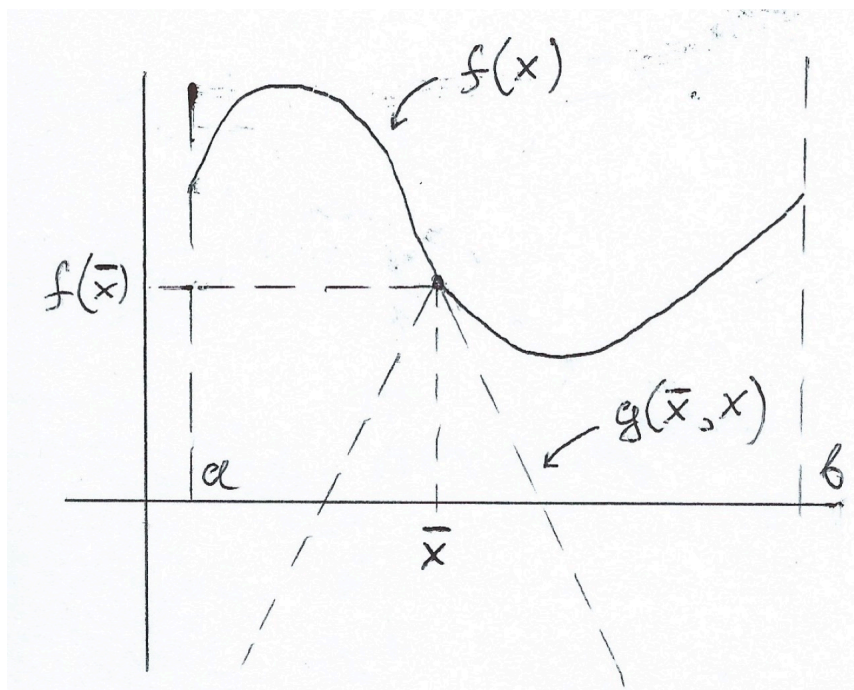
Метод ломаных также является прямым методом минимизации многомодальных функций.

Пусть

1. f удовлетворяет на $[a; b]$ условию Липшеца с константой L
2. $\bar{x} \in [a; b]$
3. Введем в рассмотрение вспомогательную функцию

$$\begin{aligned} g(\bar{x}, x) &= f(\bar{x}) - L|x - \bar{x}| \\ \bar{x} &= \text{const} \\ x &= \text{var} \end{aligned}$$

Замечание: График $g(\bar{x}, x)$ располагается ниже графика $f(x)$ так как L — константа Липшеца для f .



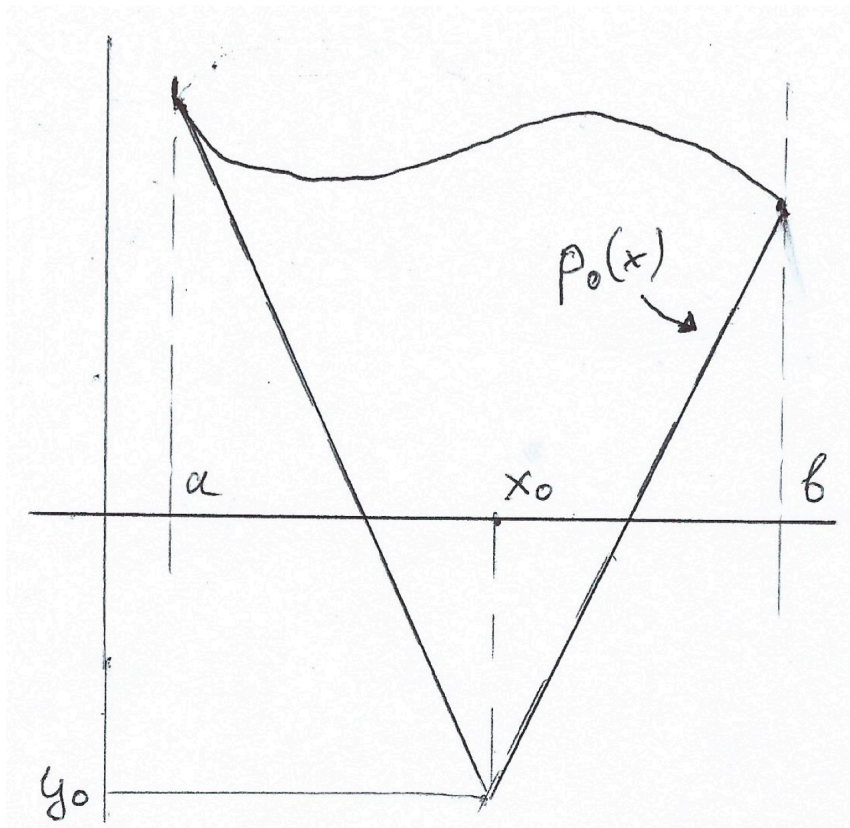
Идея метода ломаных заключается в аппроксимации целевой функции f кусочно-линейной функцией, звенья которой имеют угловые коэффициенты $\pm L$. В качестве минимального значения функции f принимается минимальное значение функции, графиком которой является эта ломанная.

Обозначим: $p_k(x)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ кусочно-линейная функция, построенная на k -ой итерации.

#0 Рассмотрим прямые

$$y = f(a) - L(x - a)$$

$$y = f(b) - L(x - b)$$



Эти прямые пересекаются в точке с координатами

$$x_0 = \frac{1}{2L} [f(a) - f(b) + L(a + b)]$$

$$y_0 = \frac{1}{2} [f(a) - f(b) + L(a - b)]$$

Примем

$$p_0(x) = \begin{cases} f(a) - L(x - a), & a \leq x \leq x_0 \\ f(b) + L(x - b), & x_0 \leq x \leq b \end{cases}$$

#1

Построим $p_1(x)$.

Функция $p_0(x)$ имеет единственную точку глобального минимума $x_0^* = x_0$.

Положим

$$p_1(x) = \max \{p_0(x), g(x_0^*, x)\}$$

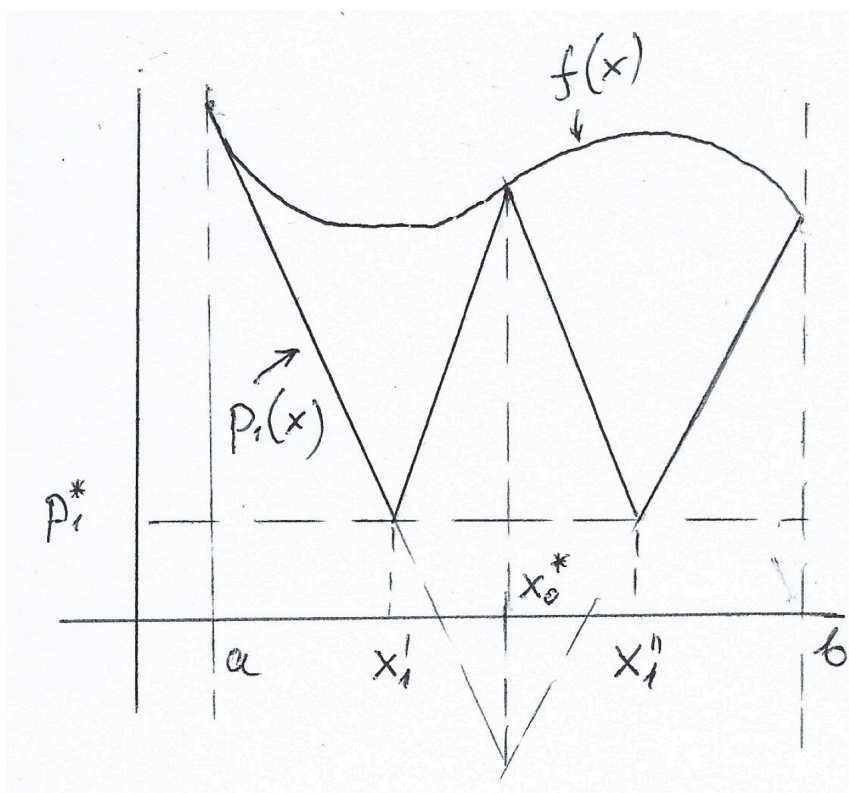
$p_1(x)$ в отличие от $p_0(x)$ вместо одной точки x_0^* глобального минимума имеет две точки x_1' и x_1'' локального минимума.

Прим этом

$$x_1' = x_0^* - \Delta_1$$

$$x_1'' = x_0^* + \Delta_1$$

$$\Delta_1 = \frac{1}{2L} [f(x_0^*) - p_0^*]$$



#2

Опишем построение функции $p_2(x)$.

Выберем произвольную точку x_1^* , в которой $p_1(x)$ имеет глобальный минимум (в нашем случае таких точек две: x_1' и x_1'' , выберем $x_1^* = x_1'$).

Положим

$$p_2(x) = \max \{p_1(x), g(x_1^*, x)\}$$

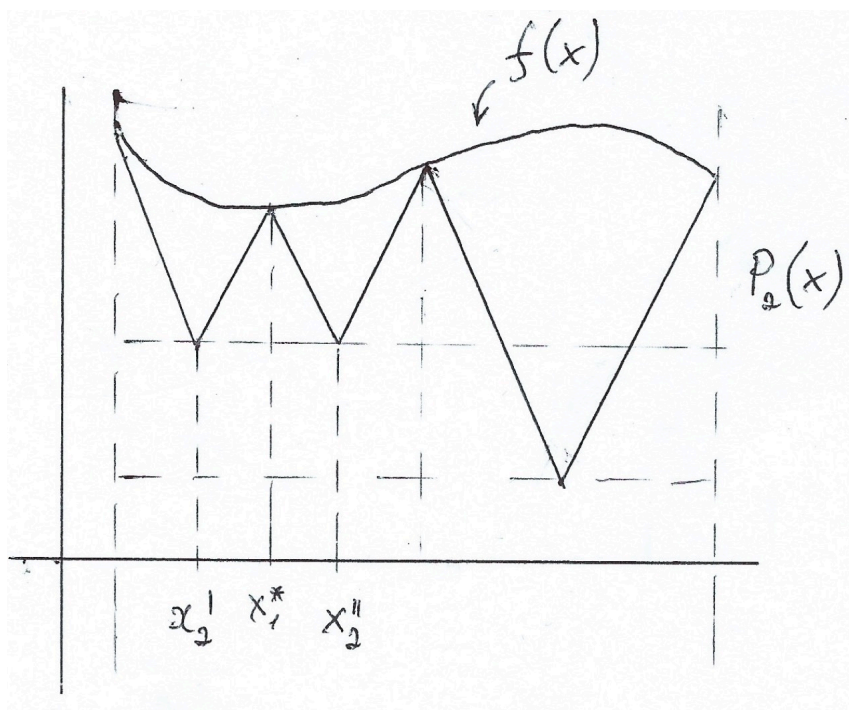
По сравнению с $p_1(x)$ функция $p_2(x)$ вместо точки x_1^* глобального минимума имеет две точки x_2' и x_2'' локального минимума

$$\begin{aligned} x_2' &= x_1 - \Delta_2 \\ x_2'' &= x_1 + \Delta_2 \\ \Delta_2 &= \frac{1}{2} [f(x_1^*) - p_1^*] \end{aligned}$$

Причем

$$p_2(x_2') = p_2(x_2'') = \frac{1}{2} [f(x_1^*) + p_1^*]$$

...



#k

Пусть построена функция $p_{k-1}(x)$. Опишем построение $p_k(x)$.

Пусть x_{k-1}^* — точка глобального минимума функции $p_{k-1}(x)$, $p_{k-1}^* = p_{k-1}(x_{k-1}^*)$.

Положим

$$p_k(x) = \max \{ p_{k-1}(x), g(x_{k-1}^*, x) \}.$$

Функция $p_k(x)$ по сравнению с $p_{k-1}(x)$ будет иметь две точки x_k' и x_k'' локального минимума вместо одной точки x_{k-1}^* глобального минимума.

При этом

$$\begin{aligned} x_k' &= x_{k-1}^* - \Delta_k \\ x_k'' &= x_{k-1}^* + \Delta_k \\ \Delta_k &= \frac{1}{2L} [f(x_{k-1}^*) - p_{k-1}^*] \end{aligned}$$

Причем

$$p_k(x_k') = p_k(x_k'') = \frac{1}{2} [f(x_{k-1}^*) + p_{k-1}^*]$$

Свойства функций $p_k(x)$

1. $p_k(x)$ — непрерывная кусочно-линейная функция, каждое звено которой имеет угловой коэффициент $+L$ или $-L$.
2. $p_k(x)$ имеет ровно $k+1$ точку локального минимума.
3. $p_{k-1}(x) \leq p_k(x) \leq f(x)$, $x \in [a; b]$
4. Ломанные $p_k(x)$ при $k \rightarrow \infty$ приближаются снизу к графику функции $f(x)$ в окрестностях точек её глобального минимума

Основное достоинство метода ломаных заключается в том, что минимум кусочно-линейной функции искать существенно проще, чем минимум $f(x)$. При этом на каждом шаге (кроме нулевого) метода ломаных требуется вычисление лишь одного значения целевой функции.

Теорема: Пусть

1. $f(x)$ удовлетворяет условию Липшеца на $[a; b]$ с константной L .
2. $p_k(x)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ — последовательность ломаных, построенных по указанному методу.

3. x_k^* — точка глобального минимума функции $p_k(x)$

Тогда

$$1. \lim_{k \rightarrow \infty} p_k(x_k^*) = f(x^*) = \min_{x \in [a; b]} f(x)$$

2. Если точка x^* глобальный минимум функции $f(x)$ единственна на $[a; b]$, то $x_k^* \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} x^*$

3. Оценка погрешности

$$\delta_k = 2L\Delta_k,$$

$$\text{где } \delta_k = f(x_k^*) - f^*$$

Замечание:

1. Последняя оценка погрешности используется в качестве критерия для остановки вычислений.
2. Если $f(x)$ имеет несколько глобальных минимумов на $[a; b]$, то есть $|G^*| \geq 2$, то пункт 2 теоремы можно сформулировать таким образом

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k = 0,$$

где ρ_k — расстояние от x_k^* до ближайшей ей точки из G^* .

< БЛОК СХЕМА !!! >

Замечание: об определении константы L

1. Если получится, то можно оценить производную $|f'(x)| \leq A$ и принять $L = A$.
2. Найти угловые коэффициенты k_1, \dots, k_l некоторого количества хорд графика функции $f(x)$. Эти значения являются нижними оценками для постоянной Липшица, тогда можно принять

$$L = \max_{i=1; l} \{k_i\} + \{\text{некоторая величина}\}$$

Если {некоторую величину} выбрать слишком большой, то метод будет долго сходиться.

Если {некоторую величину} выбрать слишком малой, так, что полученное значение L не будет постоянной Липшица для f , то метод может разойтись.

2. Безусловная минимизация функций нескольких переменных

$$\begin{cases} f(x) \rightarrow \text{extr} \\ x \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

2.1. Основные определения

Пусть $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

Определение: Точка $x^* \in \mathbb{R}^n$ называется *точкой глобального минимума* функции, если $\forall x \in \mathbb{R}^n$ $f(x^*) \leq f(x)$.

Величина $f^* = f(x^*)$ называется *глобальным минимумом* функции $f(x)$.

Замечание:

1. Множество всех точек глобальных минимумов функции на множестве $G \subseteq \mathbb{R}^n$ через G^*
2. Если $G^* = \emptyset$, то иногда рассмотрим вместо минимума функции $f(x)$ её ТНТ(?)

$$f_* = \inf_{x \in G} f(x)$$

Определение: Точка $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ называется *точкой локального минимума* функции $f(x)$, если

$$\exists \varepsilon > 0 \quad \forall x \in U_\varepsilon(\tilde{x}) \quad f(\tilde{x}) \leq f(x),$$

где

$$\begin{aligned} U_\varepsilon(\tilde{x}) &= \{x \in \mathbb{R}^n : |x - \tilde{x}| < \varepsilon\}, \\ |a - b| &= \rho(a, b) = \sqrt{(a_1 - b_1)^2 + \dots + (a_n - b_n)^2} \quad \text{— расстояние между } a \text{ и } b \\ a &= (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n \\ b &= (b_1, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

Пусть $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

Определение: Функция f называется *дифференцируемой* в точке $x^0 = (x_1^0, \dots, x_n^0)$, если её приращение в этой точке можно представить в виде

$$\Delta f|_{x^0}(\Delta x) = A_1 \Delta x_1 + \dots + A_n \Delta x_n + o(|\Delta x|),$$

где

$$\begin{aligned} \Delta x &= (\Delta x_1, \dots, \Delta x_n) \\ |\Delta x| &= \rho(\Delta x, o) = \sqrt{(\Delta x_1)^2 + \dots + (\Delta x_n)^2} \\ \Delta f|_{x^0}(\Delta x) &= f(x^0 + \Delta x) - f(x^0) \\ A &= \text{const}, \quad j = \overline{1, n} \end{aligned}$$

Если f дифференцируемая в x^0 , то

$$\exists \frac{\partial f}{\partial x_j}|_{x^0} = A_j, \quad j = \overline{1, n}$$

При этом выражение

$$df|_{x^0}(\Delta x) = \frac{\partial f}{\partial x_1}|_{x^0} \Delta x_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}|_{x^0} \Delta x_n$$

называется дифференциалом функции $f(x)$ в точке x^0 .

Определение: Производной функции $f(x)$ в точке x^0 называется матрица

$$f'(x^0) = \left(\frac{df}{dx_1}|_{x^0}, \dots, \frac{df}{dx_n}|_{x^0} \right)$$

называется *функцией Якоби*.

Определение: Градиентом функции f в точке x^0 называется вектор

$$\text{grad} f|_{x^0} = \frac{\partial f}{\partial x_1}|_{x^0} \cdot e_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_n}|_{x^0} \cdot e_n$$

где

$$\begin{aligned} e_1 &= (1, 0, \dots, 0) \\ &\dots \\ e_n &= (0, \dots, 0, 1) \end{aligned}$$

векторы стандартного базиса.

Замечание:

1. Координаты вектора $\text{grad} f|_{x^0}$ относительно стандартного базиса совпадают со строкой $f'(x^0)$.
2. $\text{grad} f|_{x^0}$ перпендикулярен касательной в точке x^0 к линии уровня функции f , которая проходит через x^0 .

3. $\text{grad}f|_{x^0}$ показывает направление наибоыстрейшего возрастания функции f в точке x^0 , то есть:

$$\max_{\vec{l}} \frac{\partial f}{\partial l} |_{x^0}$$

достигается на $\vec{l} \uparrow \uparrow \text{grad}f|_{x^0}$.

$$4. df|_{x^0}(\Delta x) = (f'(x^0), \Delta x) = f'(x^0) \Delta x^\downarrow$$

$$a = (a_1, \dots, a_n) \Rightarrow a^\downarrow = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \Rightarrow a^\downarrow = a$$

Таким образом для дифференцируемой в точке x^0 функции f

$$\Delta f|_{x^0}(\Delta x) = (f'(x^0), \Delta x) + o(|\Delta x|).$$

Определение: Матрицей Гессе (матрицей вторых производных) функции f в точке x^0 называется матрица

$$f''(x^0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} |_{x^0} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} |_{x^0} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} |_{x^0} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} |_{x^0} \end{bmatrix}$$

Определение: Вторым дифференциалом функции f в точке x^0 называется дифференциал от дифференциала первого порядка этой функции:

$$d^2 f|_{x^0}(\Delta x) = d(df|_{x^0}(\Delta x))|_{x^0}(\Delta x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} |_{x^0} \Delta x_i \Delta x_j$$

Замечание:

1. $d^2 f|_{x^0}(\Delta x) = \overrightarrow{\Delta x} f''(x^0) \Delta x^\downarrow = (f''(x^0) \Delta x^\downarrow, \Delta x)$
2. Таким образом дважды дифференцируемой в x^0 функции

$$\Delta f|_{x^0}(\Delta x) = df|_{x^0}(\Delta x) + \frac{1}{2} d^2 f|_{x^0}(\Delta x) + o(|\Delta x|^2).$$

Теорема: Необходимое условие локального экстремума

Пусть

1. f дифференцируемая в точке x^0
2. x^0 является точкой локального минимума функции f

Тогда $f'(x^0) = O = (0, \dots, 0)$

Теорема 2: Достаточное условие локального минимума

Пусть

1. $f(x)$ дважды дифференцируемая в x^0
2. $f'(x^0) = O$
3. $d^2 f|_{x^0}(\Delta x)$ является положительной квадратичной формой (или матрица $f''(x^0)$ положительно определена)

Тогда x^0 — точка локального минимума функции $f(x)$.

Замечание: Исследовать положительную определенность матрицы $A = (a_{ij})_{i,j=\overline{1;n}}$ можно использовать критерий Сильвестра

$$A > 0 \Rightarrow \begin{cases} \Delta_1 > 0 \\ \Delta_2 > 0 \\ \vdots \\ \Delta_n > 0 \end{cases},$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= a_{11} \\ \Delta_2 &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ \Delta_n &= \det A \end{aligned}$$

называются главными минорами.

Теорема 1 и теорема 2 лежат в основе классического метода безусловной оптимизации ФНП:

1. Вычисляем частные производные функции f и находим все решения a^1, \dots, a^m системы

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_1} = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0 \end{cases}$$

2. Для каждой точки a^j , $j = 1, j = \overline{1, m}$. Из найденных точек выбираем ту, которая доставляет функции наименьшее значение.
3. Из найденных в п. 2 точек выбираем ту, которая доставляет функции наименьшее значение

2.2. Выпуклые функции

Наличие нескольких локальных экстремумов функции f существенно осложняет поиск её глобального минимума, поэтому в методах оптимизации большое значение имеют функции, которые имеют один локальный минимум. В частности таковыми являются (строго) выпуклые функции.

Пусть $G \subseteq \mathbb{R}^n$ — выпуклое множество.

$$f: G \rightarrow \mathbb{R}^n$$

Определение: Функция f называется *выпуклой* на G , если $\forall x, y \in G, \forall \alpha \in [0, 1]: f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - (*)$

Определение: Функция f называется *строго выпуклой* на множестве G , если неравенство $(*)$ выполняется в строгой форме

$$\forall x, y \in G, \quad \forall \alpha \in (0, 1)$$

Определение: Функция $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ называется *сильно выпуклой*, если $\exists l > 0$

$$\forall x, y \in G, \quad \forall \alpha \in (0; 1): \quad f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - \alpha(1 - \alpha)l \cdot |x - y|^2$$

При этом l называется *константой строгой выпуклости*.

Замечание:

1. Иллюстрация для $n = 1$
2. Иллюстрация для $n = 2$

Если выпуклая функция f дифференцируемая в G , то строгая выпуклость означает, что для любой точки $x^0 \in G$ график функции лежит не ниже касательной плоскости к графику в точке x^0 (x^0 является единственной общей точкой графика и касательной плоскости). Это равносильно выполнению неравенства

$$f(x) \geq f(x^0) + (f'(x^0), x - x^0), \quad x, x^0 \in G, x \neq x^0$$

Если сильно выпуклая функция f дифференцируемая в G , то её график должен содержаться внутри некоего параболоида вращения с вершиной в точке $(x^*, f(x^*))$, где x^* — точка глобального минимума $f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$ (сильная выпуклость функции всегда имеет единственную точку глобального минимума).

Свойства выпуклых функций

1⁰ Пусть

1. $G \subseteq \mathbb{R}^n$ — выпуклое множество
2. Функции $f_1(x), \dots, f_m(x)$ — выпуклы на G .
3. $\lambda_i \geq 0, i = \overline{1; m}$

Тогда

$$f(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) \text{ выпукла на } G.$$

2⁰ Пусть

1. G — выпуклое множество
2. f выпукла на G
3. $b \in \mathbb{R}$
4. $G(b) = \{x \in G : f(x) \leq b\}$

Тогда $G(b)$ — выпуклое множество

3⁰ Пусть

1. $f \in C^2(G)$ — дважды дифференцируемая на G , которое выпукло
2. $f''(x) > 0$ (матрица положительно определена), $x \in G$

Тогда f — строго выпукла на G .

4⁰ Пусть

1. $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$
2. $\exists l > 0, f''(x) - lE > 0, x \in \mathbb{R}^n$. E — единичная матрица.

Тогда f — сильно выпуклая.

5⁰ Пусть

1. G — выпуклое множество
2. f — выпукла на G
3. $x^0 \in G$ — точка локального минимума $f(x)$

Тогда x^0 — точка глобального минимума f на G .

6⁰ Пусть

1. G — выпукло
2. f строго выпукла на G

3. x^0 — точка глобального минимума f на G

Тогда x^0 — единственная точка глобального минимума функции f на G .

7⁰ Пусть $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ — сильно выпуклая функция.

Тогда функция f имеет единственную точку глобального минимума.

8⁰ Пусть

1. G — выпукло
2. $f \in C(G)$
3. f — выпукло на G
4. $f'(x^0) = 0$

Тогда x^0 — точка глобального минимума f на G .

То есть для выпуклой дифференцируемой функции необходимое условие локального минимума является одновременно достаточным условием.

2.3. Квадратичные функции

Определение: Квадратичной функцией называется функция вида

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^n b_j x_j + c,$$

где $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$.

Замечание:

1. Всегда можно считать, что $a_{ij} = a_{ji}$.

$$a_{ij} x_i x_j + \dots + a_{ji} x_j x_i = 2 \cdot \frac{a_{ij} + a_{ji}}{2} x_i x_j = \alpha_{ij} x_i x_j + \alpha_{ji} x_j x_i$$

Если это не так, то всегда можно рассмотреть $\alpha_{ij} = \alpha_{ji} = \frac{a_{ij} + a_{ji}}{2}$. Тогда

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_i x_j.$$

2. Введем в рассмотрение $A = (a_{ij})_{i,j=1;n}$ — симметричную матрицу и вектор $b = (b_1, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n$. Тогда

$$f(x) = \frac{1}{2} \vec{x} A x^\downarrow + b x^\downarrow + c = \frac{1}{2} (Ax, x) + (b, x) + c \quad (6)$$

Свойства квадратичной функции $f(x)$

1⁰ $f'(x) = [Ax^\downarrow + b^\downarrow]^T$

2⁰ $f''(x) = A$

3⁰ Если $A > 0$, то $f(x)$ — сильно выпуклая функция, а значит единственную точку глобального минимума.

2.4. Общие принципы многомерной оптимизации

I Рассмотрим задачу

$$\begin{cases} f(x) \rightarrow \min \\ x \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

Обычно при численном решении этой задачи строят последовательность $x^0, x^1, \dots, x^k, \dots \in \mathbb{R}^n$ по следующему правилу:

$$x^{k+1} = \varphi_k(x^k, x^{k-1}, \dots, x^0)$$

$x^j \in \mathbb{R}^n, j \in \mathbb{N}_0$.

При выполнении определенных условий эта последовательность сходится к точке x^* глобального минимума функции f .

Определение: Пусть $x^0, x^1, \dots, x^k, \dots$ называется *минимизирующей* для функции f если

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) = \begin{cases} f^* = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), & G^* \neq \emptyset \\ f_* = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), & G^* = \emptyset \end{cases},$$

где G^* — множество точек глобального минимума функции $f(x)$, $G = \mathbb{R}^n$.

Пример:

1. $n = 1$

(a) $f(x) = |x^2 - x|, G = \mathbb{R}^1$
 $x^k = \frac{1}{k}, k = 1, 2, \dots$
 $G^* = \{0, 1\}, x^k \rightarrow 0 \in G^* \Rightarrow x^k$ — минимизирующая последовательность.

(b) $f(x) = e^{-|x|}$
 $G = \mathbb{R}$
 $G^* = \emptyset$
 $f_* = \inf_{x \in G} f(x) = 0$
 $x^k = k, k \in \mathbb{N}_0$ — минимизирующая для f .
 $f(x^k) \rightarrow 0 = f_*$

(c) $f(x) = \frac{|x|}{1+x^2}$
 $G = \mathbb{R}$
 $G^* = \{0\}$
 $x^k = k, k \in \mathbb{N}$ — минимизирующая последовательность, хоть и не сходится к точке минимума x^* .

II Скорость сходимости

Пусть последовательность $x^k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} x^*$.

Определение: Говорят, что сходимость последовательности $(x^k)_{k=1}^\infty$ к x^* является *линейной*, если

$$\exists q \in (0, 1) : \quad \rho(x^k, x^*) \leq q \rho(x^{k-1}, x^*),$$

или что тоже самое

$$\exists q \in (0, 1) : \quad \rho(x^k, x^*) \leq q^k \rho(x^0, x^*),$$

где $\rho(a, b) = |a - b|$ — расстояние между a и b .

Определение: Говорят, что сходимость последовательности $(x^k)_{k=0}^\infty$ к x^* является *сверхлинейной*, если

1. Существует бесконечная малая последовательность $q_1, q_2, \dots, q_k > 0$, для которой

2. $\rho(x^k, x^*) \leq q_k \rho(x^{k-1}, x^*), k \in \mathbb{N}$

Определение: Говорят, что сходимость последовательности $(x^k)_{k=1}^\infty$ к x^* является *квадратичной*, если

$$\exists c > 0 : \quad \rho(x^k, x^*) \leq [c \cdot \rho(x^{k-1}, x^*)]^2, \quad k \in \mathbb{N}$$

или что то же самое

$$\rho(x^k, x^*) \leq q^{2^k},$$

где $q = c \cdot \rho(x^0, x^*)$.

III Критерии окончания итерационных процессов

Как правило, для практически интересных функций последовательность x^k , определяемая процессом

$$x^{k+1} = \varphi_k(x^k, x^{k-1}, \dots, x^0),$$

является бесконечной. Поэтому необходимо использовать некоторые критерии окончания итерационного процесса. Как правило используют следующие условия:

$$\begin{aligned}\rho(x^{k+1}, x^k) &< \varepsilon \\ |f(x^{k+1}) - f(x^k)| &< \varepsilon \\ |\text{grad} f|_{x^{k+1}} &< \varepsilon\end{aligned}$$

или их комбинации

IV Многие алгоритмы минимизации основаны на итерационном процессе вида

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (7)$$

где $p^k \in \mathbb{R}^n$ называется направлением спуска, $\alpha_k \in \mathbb{R}$ — величиной шага.

Конкретный алгоритм минимизации определяется p^k, α_k .

Определение: Говорят, что в итерационном процессе (7) используется *исчерпывающий спуск*, если на каждом шаге для выбранного значения p^k значение α_k определяется решением задачи

$$\Phi(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k) \rightarrow \min_{\alpha \in \mathbb{R}}. \quad (8)$$

Замечание:

1. Для исчерпывающего спуска при заданном направлении p^k максимально используется возможность уменьшить значение целевой функции.
2. Задачу (8) можно решать с использованием методов одномерной оптимизации.

Теорема: Пусть

1. f дифференцируемая в \mathbb{R}^n ,
2. $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, k \in \mathbb{N}_0$,
3. при выборе $\alpha_k, k \in \mathbb{N}_0$ используется исчерпывающий спуск.

Тогда

$$(\text{grad} f|_{x^{k+1}}; p^k) = 0$$

□

$$\Phi(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k) \rightarrow \min_{\alpha}$$

Если значение $\alpha = \alpha_k$ выбрано из условия исчерпывающего спуска, то $\Phi(\alpha)$ в точке $\alpha = \alpha_k$ имеет локальный минимум. Так как f дифференцируемая, то Φ дифференцируемая, тогда в точке $\alpha = \alpha_k$ для $\Phi(\alpha)$ выполняется необходимое условие экстремума:

$$\frac{d\Phi}{d\alpha}|_{\alpha=\alpha_k} = 0$$

$$\Phi(\alpha) = f(x_1(\alpha), \dots, x_n(\alpha)),$$

где $x_j(\alpha) = x_j^k + \alpha p_j^k, j = \overline{1; n}$

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi}{d\alpha} &= \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} \cdot \frac{dx_j}{d\alpha} \\ \frac{dx_j}{d\alpha} &= p_j^k\end{aligned}$$

$$\frac{d\Phi}{d\alpha} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} p_j^k$$

$$\left. \frac{d\Phi}{d\alpha} \right|_{\alpha=\alpha_k} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f(x^k + \alpha_k p^k)}{\partial x_j} \cdot p_j^k = (\text{grad} f|_{x^{k+1}}, p^k) = 0$$

■

Замечание: С геометрической точки зрения исчерпывающий спуск означает, что на направлении, задаваемом вектором p^k , точка x^{k+1} выбирается таким образом, чтобы $\text{grad} f|_{x^{k+1}} \perp p^k$ или, что то же самое, прямая проходящая через x^k с направлением вектором p^k , была касательной к линии уровня, проходящую через точку x^{k+1} .

Теорема: Пусть

1. $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c$ — квадратичная функция.
2. $x^k \in \mathbb{R}^n$

Тогда в исчерпывающем спуске в направлении p^k

$$\alpha_k = -\frac{(\text{grad} f|_{x^k}, p^k)}{(Ap^k, p^k)} = -\frac{(Ax^k + b, p^k)}{(Ap^k, p^k)}$$

□

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$$

Умножим на матрицу A слева, а потом добавим b

$$Ax^{k+1} + b = Ax^k + b + \alpha_k Ap^k$$

$$Ax^{k+1} + b = \text{grad} f|_{x^{k+1}}, \quad Ax^k + b = \text{grad} f|_{x^k}$$

При исчерпывающем спуске для α_k должно выполняться условие

$$(\text{grad} f|_{x^{k+1}}, p^k) = 0$$

$$(Ax^k + b + \alpha_k Ap^k, p^k) = 0$$

$$(\text{grad} f|_{x^k}, p^k) + \alpha_k (Ap^k, p^k) = 0$$

$$\alpha_k = -\frac{(\text{grad} f|_{x^k}, p^k)}{(Ap^k, p^k)} = -\frac{(Ax^k + b, p^k)}{(Ap^k, p^k)}$$

■

Определение: Говорят, что вектор p^k задает направление убыванию функции f в точке x^k , если $\exists \alpha_0 > 0$

$$\forall \alpha \in (0, \alpha_0) : \quad f(x^k + \alpha p^k) < f(x^k)$$

Теорема: Пусть

1. f дифференцируемая в точке x^k ,
2. $(\text{grad} f|_{x^k}, p^k) < 0$.

Тогда p^k — направление убывания для f .

□

Ранее было показано, что для дифференцируемой функции f

$$\Delta f|_{x^k}(\Delta x) = (\text{grad} f|_{x^k}, \Delta x) + o(|\Delta x|)$$

$$\Delta x = (\Delta x_1, \dots, \Delta x_n)$$

Положим $\Delta x = \alpha p^k$. Тогда

$$\begin{aligned} f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) &= (\text{grad} f|_{x^k}, \alpha p^k) \\ f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) &= \alpha (\text{grad} f|_{x^k}, p^k) + o(\alpha \cdot |p^k|) \\ (\text{grad} f|_{x^k}, p^k) &= c < 0 \\ o(\alpha \cdot |p^k|) &= o(\alpha) \\ f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) &= \alpha \left\{ c + \frac{o(\alpha)}{\alpha} \right\} \end{aligned}$$

Так как $\frac{o(\alpha)}{\alpha} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} 0$, то для всех достаточно малых α $c + \frac{o(\alpha)}{\alpha} < 0$, то для этих α $f(x^k + \alpha p^k) - f(x^k) < 0$.

■

3. Методы безусловной минимизации ФНП

Как и методы одномерной минимизации методы оптимизации ФНП делят на:

1. Прямые методы, в которых используются только значения функции в некоторых точках и не используются значения производных.
2. Методы, использующие производные целевой функции. При этом наивысший порядок используемой в методе производной называется *порядком метода* соответствующего метода.

Мы будем изучать методы:

1. Простые
 - (а) Метод деформируемого симплекса (метод Нелдера-Мида);
 - (б) Метод покоординатного спуска;
 - (с) Метода Хука-Дживса;
 - (д) Метод случайного поиска;
2. Методы использующие производные
 - (а) Метод градиентного спуска;
 - (б) Метод наискорейшего спуска;
 - (с) Метод Ньютона и его модификация;
 - (д) Метод сопряженных направлений;

3.1. Метод деформируемого симплекса

Определение: *Правильным симплексом* в пространстве \mathbb{R}^n называется набор из $n + 1$ точки

$$x^0, x^1, \dots, x^n,$$

$x \in \mathbb{R}^n$, $j = \overline{0; n}$, каждая из которых равноудалена от всех остальных.

Замечание:

1. Отрезок, соединяющий две точки симплекса, называется *ребром* этого симплекса. Точки, образующие симплекс, называются его *вершинами*.
2. Можно ввести понятие симплекса (необязательно правильного): *симплексом* в \mathbb{R}^n называется совокупность из $n + 1$ точки x^0, x^1, \dots, x^n , таких, что векторы x^0x^1, \dots, x^0x^n — ЛНЗ.

Определение: гиперплоскость, в n -мерном аффинном пространстве, называется подпространство (плоскость), размерность которой $n - 1$.

Замечание: если $x^0 \in \mathbb{R}^n$ — некоторая точка, $a > 0$ — фиксированное число, то координаты остальных вершин одного из правильных симплексов с длиной ребра a и имеющего x^0 своей вершиной, можно найти по следующим формулам:

$$\begin{aligned} x^1 &= (x_1^0 + d_2, x_2^0 + d_1, \dots, x_n^0 + d_1), \\ x^2 &= (x_1^0 + d_1, x_2^0 + d_2, x_3^0 + d_1, \dots, x_n^0 + d_1) \\ &\dots \\ x^n &= (x_1^0 d_1, \dots, x_{n-1}^0 + d_1, x_n^0 + d_2), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} d_1 &= a \frac{\sqrt{n+1} - 1}{n\sqrt{2}}, \\ d_2 &= a \frac{\sqrt{n+1} + n - 1}{n\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

При этом, вершину x^0 будем называть *базовой* для построенного симплекса.

3.1.1. Метод правильного симплекса

Предположим, что в \mathbb{R}^n выбран правильный симплекс x^0, \dots, x^n .

1. Рассмотрим преобразование этого симплекса — отражение вершины x^k относительно центра тяжести остальных вершин.

При этом x_k и её отражение \hat{x}_k должны быть связаны соотношением

$$\frac{x_k + \hat{x}_k}{2} = x^c \Rightarrow \hat{x}_k = 2x^c - x^k$$

- 2.

$$x^c = \frac{1}{n} \sum_{i=0, i \neq k}^n x^i$$

3. Заменяем в симплексе $x^0, \dots, x^k, \dots, x^n$ вершину x^k точкой \hat{x}^k . Тогда симплекс $x^0, \dots, \hat{x}^k, \dots, x^n$ так же будет правильным.

Метод правильных симплексов для минимизации ФНП

1. Выбирают начальный правильный симплекс x^0, x^1, \dots, x^n (например, выбираем $x^0 \in \mathbb{R}^n$ и строим x^1, \dots, x^n по формулам выше).
2. Вычисляют $f(x^0), \dots, f(x^n)$.
3. Упорядочивают точки x^0, x^1, \dots, x^n так, чтобы значения функции не убывали:

$$f(x^0) \leq f(x^1) \leq \dots \leq f(x^n).$$

4. Отражают x^n относительно центра тяжести остальных точек. Получают \hat{x}^n .
5. Если значение $f(\hat{x}^n) < f(x^n)$, то $x^n := \hat{x}^n$. Далее на шаг 3. Иначе отражают x^{n-1} , строя \hat{x}^{n-1} . Если $f(\hat{x}^{n-1}) < f(x^n) \Rightarrow x^{n-1} := \hat{x}^{n-1}$. Далее на шаг 3. Иначе шаг 6.
6. Если ребро симплекса мало, то полагая $x^* = x^0 \Rightarrow$ конец работы алгоритма. Иначе уменьшаем ребро симплекса (например вдове). Строим правильный симплекс с новым значением ребра и базовой точкой x^0 , далее на шаг 2. Или $x^i := \frac{x^0 + x^i}{2}$, $i = \overline{1; n}$.

Другое условие останковки метода:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f(x^i) - f(x^0))^2 < \varepsilon^2$$

Замечание: Метод правильного симплекса неэффективен, если целевая функция имеет «овражистую» структуру.

Правильный симплекс с большой длиной ребра не будет адекватно отражать структуру линии уровня. При использовании правильного симплекса с малой длиной ребра приведет к длительной работе метода.

Для исправления этих недостатков разработан метод деформируемого симплекса.

3.1.2. Метод деформируемого симплекса

Основная идея метода заключается в том, что на шаге 4 вычисляются значения целевой функции в четырех точках:

$$\begin{aligned} z^1 &= x^c + \alpha(x^c - x^n) \\ z^2 &= x^c - \alpha(x^c - x^n), \quad \alpha \in (0; 1) \\ z^3 &= x^c + \beta(x^c - x^n), \quad \beta \approx 1 \\ z^4 &= x^c + \gamma(x^c - x^n), \quad \gamma > 1 \end{aligned}$$

Далее выбирают наименьшую из точек по значению функции вместо x^n .

Замечание:

1. Так как в рассматриваемом методе симплекс не является правильным, то и начальный симплекс не обязательно строить правильным. Например, для фиксированной точки x^0 , начальный симплекс можно построить по следующему правилу:

$$x^i = x^0 + ae^i,$$

где $e^i = (0, \dots, i, 0, \dots, 0)$ — i -ый вектор базиса.

2. Как правило, используют $\alpha = 1/2$, $\beta = 1$, $\gamma = 2$.

<!!! БЛОК СХЕМА >

Замечание: Часто в процессе работы алгоритма текущий симплекс сильно деформируется, поэтому в метод иногда добавляют процедуру восстановления симплекса: после выполнения каждых N шагов строят новый симплекс (правильный или с использованием базисных векторов) для базовой точкой x^0 текущего симплекса.