Методы оптимизации

Михайлов Максим

13 февраля 2021 г.

Оглавление

Лекция 1

10 февраля

Этот курс — о минимизации *(максимизации)* функционалов. Кроме конкретных методов оптимизации, планируется рассмотреть форматы хранения матриц, о методах работы с ними и рассмотреть 1-2 *(может быть 3)* СЛАУ с использованием различных форматов.

Т.к. значения, получаемые компьютерами — не точные, нам требуется теория погрешности.

1 Теория погрешности

Все погрешности разделяются на два класса:

1. Неустранимая — обусловлена неточностью исходных данных. Например, неточное знание физических констант или других параметров задачи. Тем не менее, необходимо знать эту погрешность, чтобы ставить рамки погрешности для решения.

2. Устранимая — погрешность процесса решения задачи. Эту погрешность можно уменьшить выбором метода решения задачи.

   (a) Погрешность модели

   (b) Остаточная погрешность *(погрешность аппроксимации)*

   Например, аппроксимация ряда первыми n его членами или аппроксимация по теореме Вейерштрасса квадратичной функцией.

   (c) Погрешность округления

   (d) Накапливаемая погрешность

   2c и 2d часто объединяют в вычислительную погрешность.

Определение. Пусть X^* — точное решение, а X — найденное *(приближенное)* решение. Тогда $X^* - X$ называется **погрешностью**, а её модуль $\Delta X = |X^* - X|$ — **абсолютная погрешность**.

Разумеется, ΔX представляет сугубо теоретический интерес, т.к. X^* неизвестна и ΔX нельзя вычислить.

Определение. В качестве требования к решению часто предоставляется **предельная абсолютная погрешность** $\Delta_X \geq |X^* - X|$.

Определение. Также существует **относительная погрешность** $\delta X = \left|\dfrac{X^* - X}{|X|}\right|$

Относительная погрешность позволяет выражать погрешность относительно значений самой величины. Например, при измерении длины парты погрешность 1 см не очень хорошо, а при измерении расстояния между городами — приемлемо.

Определение. **Предельная относительная погрешность** $\delta_X \geq \left|\dfrac{X^* - X}{|X|}\right|$

Определение. **Значащие цифры** некоторого числа — все цифры в его изображении, отличные от нуля, а также нули, если они содержатся между значащими цифрами или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряда точности.

Определение. Если значащая цифра приближенного значения a, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие $\Delta \leq 0.5 \cdot 10^k$, т.е. абсолютное значение погрешности не превосходит половину единицы этого разряда *(k — номер этого разряда)*, то такая цифра называется **верной в узком смысле**.

Цифра называется **верной в широком смысле**, если в определении выше используется 1 вместо 0.5.

Пример. $a = 3.635, \Delta a = 0.003$

- $k = 0 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$
- $k = -1 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-1} = 0.05 \geq \Delta a$
- $k = -2 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-2} = 0.005 \geq \Delta a$
- $k = -3 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0.0005 < \Delta a$

Таким образом, цифра 5 является сомнительной, остальные — верные.

Пример. Рассмотрим следующие способы записи одного и того же выражения:

$$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3 = (\sqrt{2}-1)^6 = (3-2\sqrt{2})^3 = 99 - 70\sqrt{2}$$

Посчитаем все выражения с различными приближениями $\sqrt{2}$:

- $\frac{7}{5} = 1.4$
- $\frac{17}{12} = 1.41666$
- $\frac{707}{500} = 1.414$
- $\sqrt{2} = 1.4142135624$

$\sqrt{2}$	$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$	$(\sqrt{2}-1)^6$	$(3-2\sqrt{2})^3$	$99-70\sqrt{2}$
$\frac{7}{5}$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$\frac{64}{15625} \approx 0.00\underline{5}1$	$\frac{1}{125} = 0.008$	1
$\frac{17}{12}$	$\frac{125}{24389} \approx 0.00\underline{51}3$	$\frac{15625}{2985354} \approx 0.00\underline{5}2$	$\frac{1}{216} \approx 0.00\underline{4}6$	$-\frac{1}{6} = -0.6(6)$
$\frac{707}{500}$	$\frac{8869743}{1758416743} \approx 0.005\underline{50}44$	$\frac{78672340886049}{15625 \cdot 10^{12}} \approx 0.00\underline{50}4$	$\frac{636056}{125000000} \approx 0.00\underline{50}9$	0.02

$$\Delta_{(X \pm Y)} = \Delta_X + \Delta_Y$$

$$\Delta_{(X \cdot Y)} \approx |Y|\Delta_X + |X|\Delta_Y$$

$$\Delta_{(X/Y)} \approx \left|\frac{1}{Y}\right| \Delta_X + \left|\frac{X}{Y^2}\right| \Delta_Y$$

$$|\Delta u| = |f(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1 \dots x_n)|$$

$$|\Delta u| \approx |df(x_1 \dots x_n)| = \left|\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i\right| \le \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\Delta_u = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right| \Delta x_i$$

$$|\delta u| = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_u = \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial \ln u}{\partial x_i}\right| |\Delta x_i|$$

$$\delta_{(X \pm Y)} = \left|\frac{X}{X \pm Y}\right| \delta_X + \left|\frac{Y}{X \pm Y}\right| \delta_Y$$

$$\delta_{(X \cdot Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

$$\delta_{(X/Y)} = \delta_X + \delta_Y$$

Вернемся к прошлому примеру и посчитаем относительную погрешность.

$\lhd x = \frac{7}{5}$

$$\delta_{f_1} = 3\left|\frac{1}{x-1} - \frac{1}{x+1}\right| \cdot |\delta x| = 6.25|\delta x|$$

$$\delta_{f_2} = 6\left|\frac{1}{x-1}\right| \cdot |\delta x| = 15|\delta x|$$

$$\delta_{f_3} = 6\left|\frac{1}{3-2x}\right| \cdot |\delta x| = 30|\delta x|$$

$$\delta_{f_4} = \left|\frac{90}{99-70x}\right| \cdot |\delta x| = 70|\delta x|$$

Таким образом, наибольшую погрешность даёт f_4, наименьшую — f_1.

Пример.

$$y^2 - 140y + 1 = 0$$

$$y = 70 - \sqrt{4899}$$

$$\sqrt{4899} \approx 69.99$$

$$y \approx 70 - 69.99 = 0.0\underline{1}$$

Посчитаем другим методом — избавимся от вычитания похожих чисел.

$$y = \frac{1}{70 + \sqrt{4899}}$$

$$y = \frac{1}{139.99} \approx \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.00\underline{7143}$$

Можно заметить, что результат весьма точнее.

Пример. Рассмотрим задачу вычисления суммы $S = \sum_{j=1}^{10^6} \frac{1}{j^2}$.

Если суммировать по формуле $S_n = S_{n-1} + \frac{1}{n^2}$, то из-за того, что сначала суммируются большие числа, а потом малые, погрешность велика: $\Delta = 10^6 \cdot 2^{-1} \approx 2 \cdot 10^{-4}$

Если же суммировать с конца, то $\Delta = \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right) \approx 6 \cdot 10^{-8}$

Рекомендации для увеличения точности вычислений:

1. Если складывать или вычитать последовательность чисел, то лучше начинать с малых членов.
2. Желательно избавляться от вычитания двух почти равных чисел, по возможности преобразую формулу.
3. Необходимо сводить к минимуму число математических операций. Это также способствует ускорению работы алгоритма.

4. Если ЯП и компьютер позволяют использовать числа разных типов, то числа с большим числом разрядов всегда повышают точность вычислений *(в ущерб памяти).*

Дробные числа нужно сравнивать с помощью ε, т.е. $|a - b| \leq \varepsilon$

2 Задачи оптимизации. Вводное.

Здесь и далее **целевая функция** — функция, которую мы минимизируем.

Обозначение. Пусть целевая функция — $f(x)$. Это обозначается как $f(x) \xrightarrow{x \in U} \min$.

$f(x) \to \max \Rightarrow -f(x) \to \min$. Таким образом, мы без потери общности рассматриваем задачу минимизации.

Определение. Если $\exists x^* \in U \quad f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in U$, то такой x^* называется **точкой *(глобального)* минимума**

Обозначение. Множество всех точек минимума обозначается $U^* = \{x_i^* \mid i = 1 \dots k\}$

Мы рассматриваем класс функций таких, что $U^* \neq \varnothing$

Определение. Функция $f(x)$ называется **унимодальной** на $[a, b]$, если она:

1. Непрерывна на $[a, b]$
2. $\exists \alpha, \beta : a \leq \alpha \leq \beta \leq b$, такие что:
   (a) Если $a < \alpha$, то на $[a, \alpha] \quad f(x)$ строго монотонно убывает.
   (b) Если $\beta < b$, то на $[\beta, b] \quad f(x)$ строго монотонно возрастает.
   (c) $\forall x \in [\alpha, \beta] \;\; f(x) = f_* = \min\limits_{[a,b]} f(x)$

Свойства.

1. Если функция унимодальна на $[a, b]$, то она унимодальна и на $[c, d] \subset [a, b]$
2. Если f унимодальна на $[a, b], a \leq x_1 < x_2 \leq b$, тогда:
   (a) Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$
   (b) Если $f(x_1) > f(x_2)$, то $x^* \in [x_1, b]$

Определение. $f(x)$, заданная на $[a, b]$, называется выпуклой на этом отрезке, если

$$\forall x', x'' \in [a, b], \alpha \in [0, 1] \quad f(\alpha x' + (1 - \alpha)x'') \leq \alpha f(x') + (1 - \alpha)f(x'')$$

Свойства.

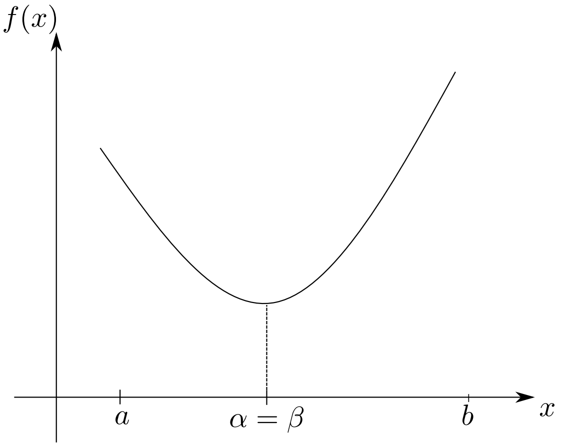

Рис. 1.1: Вырожденные α и β, унимодальная функция

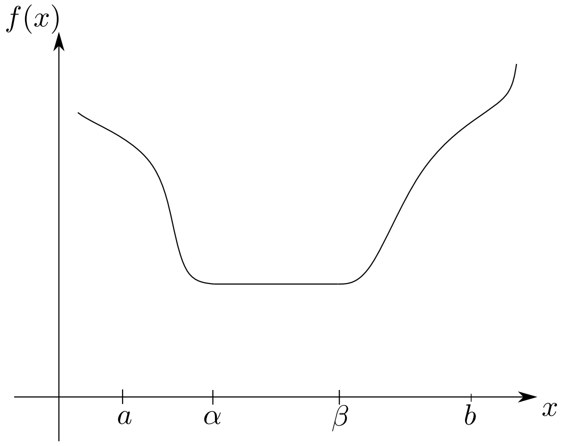

Рис. 1.2: Унимодальная функция

1. Если $f(x)$ выпукло на $[a, b]$, то $\forall [x', x''] \subset [a, b]$, то её график расположен ниже хорды между x' и x''
2. Всякая выпуклая функция на отрезке является унимодальной на нём.

Определение. Стационарные точки — точки x, для которых $f'(x) = 0$.

Мы будем рассматривать одномерные задачи оптимизации, т.к. многомерные задачи часто сводятся к одномерным.

3 Одномерная минимизация функций. Прямые методы.

Прямые методы — методы, не использующие производные целевой функции.

3.1 Метод дихотомии

Этот метод — тернарный поиск.

$$x_1 = \frac{b + a - \delta}{2} \quad x_2 = \frac{b + a + \delta}{2}$$
$$\tau = \frac{b - x_1}{b - a} = \frac{x_2 - a}{b - a} \to \frac{1}{2}$$
$$x^* \in [a_i, b_i] \ \forall i$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2, вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$

Шаг 2: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

- Если $f(x_1) \le f(x_2)$, переходим к отрезку $[a, x_2]$, т.е. $b = x_2$
- Иначе переходим к $[x_1, b]$, т.е. $a = x_1$

Шаг 3: $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$, где n — номер итерации.

- Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, переходим к новой итерации.
- Если $\varepsilon_n \le \varepsilon$, завершаем поиск и переходим к шагу 4.

Шаг 4: $X^* \approx \overline{X} = \frac{a+b}{2}$

δ надо выбирать ???

Примечание. δ выбирается на интервале $(0, 2\varepsilon)$. Чем меньше δ, тем больше относительное уменьшение длины отрезка на каждой итерации. При черезмерно малом δ сравнение $f(x_1)$ и $f(x_2)$ будет затруднительно, т.к. они близки.

Мы можем оценить число необходимых итераций:

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