

Методы оптимизации

Михайлов Максим

18 февраля 2021 г.

Оглавление

Лекция 1	10 февраля	2
1	Теория погрешности	2
2	Задачи оптимизации. Вводное.	6
3	Одномерная минимизация функций. Прямые методы.	7
3.1	Метод дихотомии	7
Лекция 2	17 февраля	9
3.2	Метод золотого сечения	9
3.3	Метод Фибоначчи	10
3.4	Метод парабол	11
3.5	Комбинированный метод Брента	11

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. Неустраняемая — 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** $\delta X = \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$

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** $\delta_X \geq \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$

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 $\sqrt{2}$:

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

$\sqrt{2}$	$\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$	$(\sqrt{2}-1)^6$	$(3-2\sqrt{2})^3$	$99-70\sqrt{2}$
$\frac{7}{5}$	$\frac{1}{216} \approx 0.0046$	$\frac{64}{15625} \approx 0.0051$	$\frac{1}{125} = 0.008$	1
$\frac{17}{12}$	$\frac{125}{24389} \approx 0.00513$	$\frac{15625}{2985354} \approx 0.0052$	$\frac{1}{216} \approx 0.0046$	$-\frac{1}{6} = -0.6(6)$
$\frac{707}{500}$	$\frac{8869743}{1758416743} \approx 0.005044$	$\frac{78672340886049}{15625 \cdot 10^{12}} \approx 0.00504$	$\frac{636056}{125000000} \approx 0.00509$	0.02

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Вернемся к прошлому примеру и посчитаем относительную погрешность.

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

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

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

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

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

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

Пример.

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

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

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

$$y \approx 70 - 69.99 = 0.01$$

Посчитаем другим методом — избавимся от вычитания похожих чисел.

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

$$y = \frac{1}{139.99} \approx \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.007143$$

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 избегать 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 $f(x) \xrightarrow{x \in U} \min$.

$f(x) \rightarrow \max \Rightarrow -f(x) \rightarrow \min$. 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 $U^* \neq \emptyset$

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:
 - (а) Если $a < \alpha$, то на $[a, \alpha]$ $f(x)$ строго монотонно убывает.
 - (б) Если $\beta < b$, то на $[\beta, b]$ $f(x)$ строго монотонно возрастает.
 - (с) $\forall x \in [\alpha, \beta] \quad f(x) = f_* = \min_{[a, b]} f(x)$

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:
 - (а) Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $x^* \in [a, x_2]$
 - (б) 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.

$$x_1 = \frac{b + a - \delta}{2} \quad x_2 = \frac{b + a + \delta}{2}$$

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

$$x^* \in [a_i, b_i] \quad \forall i$$

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 $f(x_1) \leq f(x_2)$, 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 $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, завершаем поиск и переходим к шагу 4.

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

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

Мы можем оценить число необходимых итераций:

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

Лекция 2

17 февраля

3.2 Метод золотого сечения

Рассмотрим отрезок $[0, 1]$. Пусть $x_2 = \tau$, тогда симметрично расположенная $x_1 = 1 - \tau$. Пусть дальше был выбран отрезок $[0, \tau]$, тогда пусть $x'_2 = 1 - \tau$. Чтобы новые точки делили отрезок в таком же соотношении, необходимо, чтобы $\frac{1}{\tau} = \frac{\tau}{1-\tau} \Rightarrow \tau^2 = 1 - \tau \Rightarrow \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \approx 0.61803$. Таким образом, $x_1 = 1 - \tau = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$, $x_2 = \tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$

В общем случае для отрезка $[a, b]$:

$$x_1 = a + \frac{3 - \sqrt{5}}{2}(b - a), x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a) \quad (1)$$

Вычислим погрешность:

$$\Delta_n = \tau^n(b - a) \quad \varepsilon_n = \frac{\Delta_n}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{5} - 1}{2} \right)^n (b - a)$$

Для заданного ε условия окончания $\varepsilon_n \leq \varepsilon$.

Результат метода:

$$x^* = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$$

Оценка числа шагов для достижения искомой точности:

$$n \geq \ln \left(\frac{\frac{2\varepsilon}{b-a}}{\ln \tau} \right) \approx 2 \cdot 1 \cdot \ln \left(\frac{b-a}{2\varepsilon} \right)$$

Шаг 1: Находим x_1 и x_2 по формуле (1), вычисляем $f(x_1)$ и $f(x_2)$. $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$, $\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$.

Шаг 2: – Если $\varepsilon_n > \varepsilon$, переходим к шагу 3.

– Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, переходим к шагу 4.

Шаг 3: Сравниваем $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

– Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то $b = x_2, x_2 = x_1, x_1 = b - \tau(b - a)$. Мы запоминаем $f(x_2)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_1)$ на этом шаге.

– Иначе $a = x_1, x_1 = x_2, f(x_1) = f(x_2)$. Мы запоминаем $f(x_1)$ для следующего шага, т.к. оно равно $f(x_2)$ на этом шаге.

Шаг 4: $X^* \approx \bar{X} = \frac{a(n)+b(n)}{2}$

3.3 Метод Фибоначчи

Мы знаем, что $F_n = \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^n}{\sqrt{5}}$, а также при $n \rightarrow +\infty$ $F_n \approx \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n}{\sqrt{5}}$

Рассмотрим нулевую итерацию:

$$x_1 = a + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b - a) \quad x_2 = a + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b - a)$$

Рассмотрим k -тую итерацию:

$$x_1 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

$$x_2 = a_{(k)} + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

Пусть $k = n$, тогда:

$$x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+2}}(b_0 - a_0) \quad x_2 = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

Условие на погрешность:

$$\frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b_0 - a_0}{F_{n+2}} < \varepsilon$$

Какое брать n ? Такое, что $\frac{b_0 - a_0}{\varepsilon} < F_{n+2}$

Есть проблема, при большом n $\frac{F_n}{F_{n+2}}$ есть бесконечная десятичная дробь, вследствие чего образуется погрешность.

Рис. 2.1: Функция $f(x)$ и её приближение параболой.

3.4 Метод парабол

Пусть $\exists x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$, такие что $\begin{cases} x_1 < x_2 < x_3 \\ f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3) \end{cases}$

Тогда приближающая парабола имеет вид $q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$.

Мы имеем условия на коэффициенты этой параболы: $\begin{cases} q(x_1) = f(x_1) = f_1 \\ q(x_2) = f(x_2) = f_2 \\ q(x_3) = f(x_3) = f_3 \end{cases}$

Коэффициенты можно найти следующим образом:

$$a_1 = f_1 \quad a_2 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \quad a_3 = \frac{1}{x_3 - x_2} \left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \right)$$

Тогда результат итерации есть $\bar{x} = \frac{1}{2} \left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right)$, на следующей лекции будет рассказан переход к следующей итерации.

3.5 Комбинированный метод Брента

Для собственного изучения.