

Лекции по Методам оптимизации 4 семестр

Пяа Yaroshevskiy

16 марта 2021 г.

Оглавление

1		3
2	Лекции 1 и 2	4
2.1	Теория погрешности	4
2.1.1	Значащие цифры	5
2.1.2	Верные цифры	5
2.1.3	Распространение погрешности	5
2.2	Одномерная минимизация функций	7
2.2.1	Унимодальные функции	7
2.2.2	Прямые методы	8
3		9
3.1	Одномерный поиск	9
3.1.1	Метод золотого сечения	9
3.1.2	Метод Фибоначчи	10
3.1.3	Метод парабол	11
4		12
4.1	Одномерная оптимизация	12
4.1.1	Определение интервала неопределенности	12
4.2	Методы с использованием производной	13
4.2.1	Метод средней точки	13
4.2.2	Метод хорд(метод секущей)	13
4.2.3	Метод Ньютона(метод касательной)	14
5		16
5.1	Метод Ньютона(продолжение). Вывод через ряд Тейлора . . .	16
5.1.1	Аппроксимация производных	17
5.1.2	Метод Ньютона(продолжение)	17
5.1.3	Модификации метода Ньютона	18
5.1.4	TODO Метод минимизации многомодальных функций . . .	18

ОГЛАВЛЕНИЕ	2
6	19
6.1 Постановка задачи	19
6.1.1 Свойства квадратичных форм	20
6.1.2 Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций	20
6.1.3 Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума	22

Лекция 1

Лекция 2

Лекции 1 и 2

2.1 Теория погрешности

Отклонение от теоретического решения Виды погрешности:

1. Неустраняемая погрешность

Пример. Физические величины, другие константы

2. Устраняемая погрешность Связана с методом решения

- (a) Погрешность модели

Связана с математической формулировкой задачи. Она плохо отображает реальную модель

- (b) Остаточная погрешность (Погрешность аппроксимации)

- (c) Погрешность округления

- (d) Накапливаемая погрешность

Нецелые числа

-
- X^* — точное решение

- X — Приближенное решение

- $X^* - X$ — погрешность

- $\Delta X = |X^* - X|$ — абсолютная погрешность

$\Delta_X \geq |X^* - X|$ — предельная абсолютная погрешность, т.е.

$$X - \Delta_X \leq X^* \leq X + \Delta_X$$

- $\delta X = \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$ — относительная погрешность

$\delta_X \geq \left| \frac{X^* - X}{|X|} \right|$ — предельная относительная погрешность

2.1.1 Значащие цифры

Определение. Все цифры в изображении отличные от нуля, и нули если они содержатся между значащими цифрами, или расположены в конце числа и указывают на сохранение разряды точности. Нули стоящие левее, отличной от нуля цифры, не являются значащими цифрами. Между ненулевыми, или указывающие на точность

Пример. $\underbrace{0.00}_{\text{незнач.}} 2080$

Пример. $689000 = 0.689 \cdot 10^6$ — 3 значащие цифры $689000 = 0.689000 \cdot 10^6$ — 6 значащих цифр

2.1.2 Верные цифры

Если, значащая цифра приближенного значения, находящаяся в разряде, в котором выполняется условие — абсолютное значение погрешности не превосходит половину единицы этого разряда $\Delta \leq 0.5 \cdot 10^k$, где k — номер разряда, то она называется верной

Пример. $a = 3.635$
 $\Delta a = 0.003$

$$(3) \quad k = 0 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$$

$$(6) \quad k = -1 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-1} = 0.05 \geq \Delta a$$

$$(3) \quad k = -2 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-2} = 0.005 \geq \Delta a$$

$$(5) \quad k = -3 \quad \frac{1}{2} \cdot 10^{-3} = 0.0005 < \Delta a \Rightarrow 5 \text{ — сомнительная цифра}$$

2.1.3 Распространение погрешности

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

$$\sqrt{2}$$

$$\frac{7}{5} = 1.4$$

$$\frac{17}{12} = 1.41666$$

$$\frac{707}{500} = 1.414$$

$$\sqrt{2} = 1.4142145624$$

$$\begin{aligned}
\Delta_{x \pm y} &= \Delta_x \pm \Delta_y \\
\Delta_{(x \cdot y)} &\approx |Y| \Delta_X + |X| \Delta_Y \\
\Delta_{(\frac{x}{y})} &\approx \left| \frac{1}{Y} \right| \Delta_X + \left| \frac{X}{Y^2} \right| \Delta_Y \\
|\Delta u| &= |f(x_1 + \Delta x_1, \dots, x_n + \Delta x_n) - f(x_1, \dots, x_n)| \\
|\Delta u| &\approx |df(x_1, \dots, x_n)| = \left| \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \Delta x_i \right| \leq \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \quad (2.1) \\
|\delta u| &= \frac{2.1}{|u|} = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{1}{u} \right| \cdot |\Delta x_i| = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \ln u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \\
\delta_u &= \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial \ln u}{\partial x_i} \right| \cdot |\Delta x_i| \\
\delta_{(X \pm Y)} &= \left| \frac{X}{X \pm Y} \right| \delta_X + \left| \frac{Y}{X \pm Y} \right| \delta_Y \\
\delta_{(X \cdot Y)} &= \delta_X + \delta_Y \\
\delta_{(\frac{X}{Y})} &= \delta_X + \delta_Y
\end{aligned}$$

Пример. $x = \frac{7}{5}$

- $f_1 = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1} \right)$

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

- $f_2 = (\sqrt{2} - 1)^6$

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

- $f_3 = (3 - 2\sqrt{2})^3$

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

- $f_4 = 99 - 70\sqrt{2}$

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

Пример.

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

Вычислить корни.

- $y = 70 - \sqrt{4899}$
 $\sqrt{4899} = 69.992 \dots$
 $\sqrt{4899} \approx 69.99$
 $y \approx 70 - 69.99 = 0.01$

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

$$\sqrt{4899} = 69.99; 70 + 69.99 = 139.99$$

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

2.2 Одномерная минимизация функций

2.2.1 Унимодальные функции

$$f(x) \rightarrow \min, x \in U$$

$$f(x) \rightarrow \max \Rightarrow -f(x) \rightarrow \min$$

$$x^* \in U \text{ — точка минимума: } f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in U$$

U^* — множество точек минимума

$$\tilde{x} \in U : \exists V(\tilde{x}) \quad \forall x \in V \quad f(\tilde{x}) \leq f(x) \text{ — локальный минимум}$$

Определение. $f(x)$ — **унимодальная функция** на $[a, b]$, если:

1. $f(x)$ — непрерывна на $[a, b]$
2. $\exists \alpha, \beta : a \leq \alpha \leq \beta \leq b$
 - (а) Если $a < \alpha$, то $[a, \alpha]$ $f(x)$ — монотонно убывает
 - (б) Если $\beta < b$, то на $[\beta, b]$ $f(x)$ — монотонно возрастает
 - (с) $\forall x \in [\alpha, \beta] \quad f(x) = f^* = \min_{[a, b]} f(x)$

Примечание. Свойства:

1. Любая из точек локального минимума является глобальным минимумом на этом же отрезке
2. Функция унимодальная на $[a, b]$ унимодальна на $[c, d] \subset [a, b]$
3. $f(x)$ унимодальна на $[a, b]$ $a \leq x_1 < x_2 \leq b$
 - (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. $f(x)$ **выпукла** на $[a, b]$, если:

- $\forall x', x'' \in [a, b]$ и $\alpha \in [0, 1]$:

$$f(\alpha x' + (1 - \alpha)x'') \leq \alpha f(x') + (1 - \alpha)f(x'')$$

Примечание. Свойства:

1. Если $f(x)$ на $[a, b]$ $[x', x''] \subset [a, b]$
2. Всякая выпуклая и непрерывная функция на $[a, b]$ является унимодальной на этом отрезке. Обратное не верно

Определение. $x : f'(x) = 0$ — **стационарная точка**

2.2.2 Прямые методы

Не требуют вычисление производной. Могут использовать только известные значения.

1. Метод дихотомии

$$x_1 = \frac{b + a - \delta}{2} \quad x_2 = \frac{b + a + \delta}{2} \quad (2.2)$$

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

$$X^*[a_i, b_i] \quad \frac{b_i - a_i}{2} \leq \varepsilon$$

(a) x_1 и x_2 ; вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$

(b) $f(x_1)$ и $f(x_2)$

- Если $f(x_1) \leq f(x_2) \rightarrow [a, x_2]$, т.е. $b = x_2$
- Иначе $[x_1, b] \rightarrow [x_1, b]$, т.е. $a = x_1$

(c) $\varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$ (n — номер итерации)

- Если $\varepsilon_n > \varepsilon$ — переход к следующей итерации (шаг 1)
- Если $\varepsilon_n \leq \varepsilon$, завершить поиск (шаг 4)

(d) $x^* \approx \bar{x} = \frac{a+b}{2} \quad f^* \approx f(\bar{x})$

2.2 $\delta \in (0, 2\varepsilon)$

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

Лекция 3

3.1 Одномерный поиск

3.1.1 Метод золотого сечения

Примечание. Возьмем отрезок $[0, 1]$

- $x_2 = \tau \Rightarrow x_1 = 1 - \tau$
- $x_1 \Rightarrow x'_2 = 1 - \tau \in [0, \tau]$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\tau}{1 - \tau} \Rightarrow \tau^2 = 1 - \tau$$

$$\tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.61803$$

- $x_1 = 1 - \tau = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}$

- $x_2 = \tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$

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

2. $x_2 = a + \frac{\sqrt{5} - 1}{2}(b - a)$

$$\Delta_n = \tau^n(b - a)$$

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

ε — задано. Окончание: $\varepsilon_n \leq \varepsilon$

На n -ой итерации: $x^* = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$

$$n \geq \frac{\ln \left(\frac{2\varepsilon}{b-a} \right)}{\ln \tau} \approx 2.1 \ln \left(\frac{b-a}{2\varepsilon} \right)$$

Алгоритм.

1. x_1, x_2 по формулам 1 и 2

$$\tau = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \quad \varepsilon_n = \frac{b-a}{2}$$

2. $\varepsilon_n > \varepsilon$ — шаг 3, иначе 4

3. Если $f(x_1) \leq f(x_2)$, то:

- запоминаем $f(x_1)$
- $b = x_1$
- $x_2 = x_1$
- $x_1 = a + \tau(b-a)$

Иначе:

- запоминаем $f(x_2)$
- $a = x_1$
- $x_1 = x_2$
- $x_2 = b - \tau(b-a)$

$\varepsilon_n = \tau \varepsilon_n$, переход к шагу 2

4. $x^* = \bar{x} = \frac{a_{(n)} + b_{(n)}}{2}$
 $f^* \approx f(\bar{x})$

3.1.2 Метод Фибоначчи

$$F_{n+2} = F_{n+1} + F_n, \quad n = 1, \quad F_1 = F_2 = 1$$

$$F_n = \left(\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^n \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$F_n \approx \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^n \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \quad n \rightarrow \infty$$

Итерация 0:

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

Итерация k :

•

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

•

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

Итерация n :

$$\bullet \quad x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+1}}(b_0 - a_0)$$

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

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

Как выбирать n :

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

Когда n большое $\Rightarrow \frac{F_n}{F_{n+2}}$ — бесконечная десятичная дробь

3.1.3 Метод парабол

$$\bullet \quad x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$$

$$\bullet \quad x_1 < x_2 < x_3$$

$$\bullet \quad f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3)$$

$$q(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2)$$

$$\bullet \quad q(x_1) = f(x_1) = f_1$$

$$\bullet \quad q(x_2) = f(x_2) = f_2$$

$$\bullet \quad q(x_3) = f(x_3) = f_3$$

$$\bullet \quad a_0 = f_1$$

$$\bullet \quad a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}$$

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

$$\bar{x} = \frac{1}{2} \left(x_1 + x_2 - \frac{a_1}{a_2} \right) \text{ — минимум параболы } q(x)$$

Лекция 4

$$\frac{l_{\text{з.с.}}^i}{l_{\text{дих.}}^i} \approx (0.87 \dots)^n$$

$$\frac{l_{\text{з.с.}}^i}{l_{\text{Фиб.}}^i} \approx 1.17$$

4.1 Одномерная оптимизация

4.1.1 Определение интервала неопределенности

x_0

1. Если $f(x_0) > f(x_0 + \delta)$, то:

- $k = 1$
- $x_1 = x_0 + \delta$
- $h = \delta$

иначе если $f(x_0) > f(x_0) - \delta$, то:

- $x_1 = x_0 - \delta$
- $h = -\delta$

2. Удваиваем h :

- $h = 2h$
- $x_{k+1} = x_k + h$

3. Если $f(x_k) > f(x_{k+1})$, то:

- $k = k + 1$
- переходим к шагу 2

Иначе:

- прекращаем поиск $[x_{k-1}, x_{k+1}]$

4.2 Методы с использованием производной

- $f(x)$ — дифференцируемая или дважды дифференцируемая выпуклая функция
- вычисление производных в заданных точках

$f'(x) = 0$ — необходимое и достаточное условие глобального минимума.
Если $x^* \in [a, b]$ $f'(x) \approx 0$ или $f'(x) \leq \varepsilon$ — условие остановки вычислений

4.2.1 Метод средней точки

$$f'(x) \quad \bar{x} = \frac{a+b}{2}$$

- Если $f'(\bar{x}) > 0$, то $\bar{x} \in$ монотонно возрастающая $f(x)$, минимум на $[a, \bar{x}]$
- Если $f'(\bar{x}) < 0$ минимум на $[\bar{x}, b]$
- Если $f'(\bar{x}) = 0$ то $x^* = \bar{x}$

Алгоритм

1. $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$, вычислим $f'(\bar{x}) \rightarrow$ шаг 2
2. Если $|f'(\bar{x})| \leq \varepsilon$, то $x^* = \bar{x}$ и $f(x^*) = f(\bar{x}) \rightarrow$ завершить
3. Сравнить $f'(\bar{x})$ с нулем:
 - Если $f'(\bar{x}) > 0$, то $[a, \bar{x}], b = \bar{x}$
 - Иначе $[\bar{x}, b], a = \bar{x}$ \rightarrow шаг 1

$$\Delta_n = \frac{b-a}{2^n}$$

4.2.2 Метод хорд(метод секущей)

Если на концах $[a, b]$ $f'(x)$: $f'(a) \cdot f'(b) < 0$ и непрерывна, то на (a, b)
 $\exists x$ $f'(x) = 0$
 $f(x)$ — минимум на $[a, b]$, если $f'(x) = 0$, $x \in (a, b)$
 $F(x) = f'(x) = 0$ на $[a, b]$
 $F(a) \cdot F(b) < 0$, \bar{x} — точка пересечения $F(x)$ с осью Ox на $[a, b]$

$$\bar{x} = a - \frac{f'(a)}{f'(a) - f'(b)}(a - b) \quad (4.1)$$

$x^* \in [a, \tilde{x}]$ либо $[\tilde{x}, b]$

Алгоритм

1. \tilde{x} — вычислим по 4.1
вычислим $f'(\tilde{x}) \rightarrow$ шаг 2
2. Если $|f'(\tilde{x})| \leq \varepsilon$, то:
 - $x^* = \tilde{x}$
 - $f^* = f(\tilde{x})$
 - завершить

Иначе:

- \rightarrow шаг 3
3. Переход к новому отрезку. Если $f'(\tilde{x}) > 0$, то:
 - $[a, \tilde{x}]$
 - $b = \tilde{x}$
 - $f'(b) = f'(\tilde{x})$

Иначе:

- $[\tilde{x}, b]$
- $a = \tilde{x}$
- $f'(a) = f'(\tilde{x})$

\rightarrow шаг 1

Исключение.

1. $f'(a) \cdot f'(b) > 0$, $f(x)$ — возрастает
 - $x^* = a$
 - $x^* = b$
2. $f'(a) \cdot f'(b)$, **одно из:**
 - $x^* = a$
 - $x^* = b$

4.2.3 Метод Ньютона(метод касательной)

Если выпуклая на $[a, b]$ функция $f(x)$ — дважды непрерывно дифференцируема, то $x^* \in [a, b] : f'(x) = 0$

Пусть $x_0 \in [a, b]$ — начальное приближение к x^*

$F(x) = f'(x)$ — линеаризуем в окрестности x_0

$(x_0, f'(x_0))$, то есть:

$$F(x) \approx F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0)$$

x_1 —

- следующее приближение к x^*
- пересечение касательной с Ox

При $x = x_1$:

$$F(x_0) + F'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$

$$x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$$

$\{x_k\}$, $k = 1, 2, \dots$ — итерационная последовательность
 $F(x)$ в точке $x = x_k$ имеет вид:

$$y = F(x_k) + F'(x_k)(x - x_k)$$

$x = x_{k+1}$ $y = 0$:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{F'(x_k)}$$

$$f'(x) = 0 \quad x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Итерационный процесс: $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$:

- $x^* \approx x$
- $x^* \approx f(x_k)$

Лекция 5

5.1 Метод Ньютона(продолжение). Вывод через ряд Тейлора

- x_k — текущая оценка решения x^*

$$f(x_k + p) = f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2!}p^2 f''(x_k) + \dots$$

$$f(x^*) = \min_x f(x) = \min_p f(x_k + p) = \min_p [f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k) + \dots] \approx$$

$$\approx \min_p [f(x_k) + pf'(x_k) + \frac{1}{2}p^2 f''(x_k)]$$

$$f'(x_k) + pf''(x_k) = 0$$

$$p = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

p — аппроксимация шага: от $x_k \rightarrow x^*$. $x^* \approx x_k + p$

$$x_{k+1} = x_k + p = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \quad (5.1)$$

Главное преимущество метода Ньютона:

- высокая(квадратичная) скорость сходимости
 - если x_k достаточно близка x^* и если $f''(x^*) > 0$, то:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \beta |x_k - x^*|^2, \quad \beta = \text{const} > 0$$

Неудачи в методе Ньютона:

1. $f(x)$ плохо аппроксимируется первыми тремя членами в ряде Тейлора.
 x_{k+1} может быть хуже x_k

2. $p = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$ определено только тогда, когда $f''(x_k) \neq 0$
 $f''(x_k) > 0$ — условие минимума квадратичной аппроксимации
 Если $f''(x_k) < 0$ — алгоритм сходится к максимуму
3. Кроме $f(x)$ нужно вычислять $f'(x)$ и $f''(x)$, что в реальных задачах затруднительно

5.1.1 Аппроксимация производных

Правая разностная схема:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k + h) - f(x_k)}{h}, h \sim \varepsilon$$

Центральная разностная схема:

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

порядок точности — $O(h^2)$

5.1.2 Метод Ньютона(продолжение)

Если $f(x)$ — квадратичная функция, то $f'(x)$ — линейная

В 5.1 точное равенство, и следовательно метод Ньютона сходится за один шаг, при любом выборе x

Пусть $x^* \in [a, b]$ и $f(x)$ — трижды непрерывно дифференцируемая и выпуклая на $[a, b]$ функция.

$\{x_k\}$ будет сходится к пределу x^* монотонно, если:

$$0 < \frac{x^* - x_{k+1}}{x^* - x_k} < 1$$

$$f'(x^*) = 0 = f'(x_k) + f''(x_k)(x^* - x_k) + \frac{f'''(x_k)}{2}(x^* - x_k)^2$$

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

Итерационная последовательность $\{x_k\}$ монотонна, если $\frac{f'''(x)}{f'(x_k)} > 0$, то есть достаточное условие ...

Пример.

$$f(x) = x \cdot \arctg(x) - \frac{1}{2} \ln(1 + x^2)$$

, пусть $|f'(x)| \leq 10^{-7}$

1 `from sympy import *`

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

$$f'(x)''(x) < 0$$

Выбор начального приближение $x_0 = 1$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$
0	1	0.785	$\frac{1}{2}$
1	-0.57	-0.518	0.754
2	0.117	0.116	...
3
4	$9 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-8}$...

Выполнилось условие $|f'(x_k)| \leq 10^{-7}$ — окончание итерационного процесса.
 $x \approx 9 \cdot 10^{-8} \approx 0$

5.1.3 Модификации метода Ньютона

1. Метод Ньютона-Рафсона

$$x_{k+1} = x_k - \tau_k \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad 0 < \tau_k \leq 1$$

$\tau_k = \tau = \text{const}$ ($\tau = 1$ — метод Ньютона)

$$\varphi(\tau) = f(x_k - \tau \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}) \rightarrow \min$$

$$\tau_k = \frac{(f'(x_k))^2}{(f'(x_k))^2 + (f'(\tilde{x}_k))^2}$$

, где $\tilde{x} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$

2. Метод Маркрафта

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k) + \mu_k}, \quad \mu_k > 0$$

μ_0 рекомендуется выбирать на порядок больше значения второй производной в x_0

μ_{k+1} : $\mu_{k+1} = \frac{\mu_k}{2}$, если $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, иначе $\mu_{k+1} = 2 \cdot \mu_k$

5.1.4 TODO Метод минимизации многомодальных функций

1. Метод ломанных Условие Липшица: $f(x)$, $x \in [a, b]$ будет удовлетворять условию, если:

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|, \quad \forall x_1, x_2 \in [a, b]$$

Лекция 6

6.1 Постановка задачи

1. $x^* = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, $x_i \in U \subset E_n$, где U — множество допустимых значений, E_n — евклидово пространство размера n . $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$.
Если ставится задача найти максимум, то можно перейти к поиску минимума: $f(x^*) = \max_{x \in U} f(x) = -\min_{x \in U} (-f(x))$
2. $f(x^*) = \text{extr}_{x \in U} f(x)$
3. Если U задается ограничением на вектор x , то задача поиска условного экстремума. Если $U = E_n$ — не имеет ограничений, то задача поиска безусловного экстремума
4. Решение задачи поиска экстремума — пара $(x^*, f(x^*))$

Если $\forall x \in U \ f(x^*) \leq f(x)$ — то x^* — глобальный минимум. Локальный минимум $x^* \in U$: если $\exists \varepsilon > 0$, что $\forall x \in U$ и $\|x - x^*\| < \varepsilon$, то $f(x^*) \leq f(x)$

Определение. Поверхностью уровня функции $f(x)$ называется множество точек, в которых функция принимает постоянные значения, т.е. $f(x) = \text{const}$

Определение. Градиентом $\nabla f(x)$ непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ в x :

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Градиент направлен по нормали к поверхности уровня, т.е. перпендикулярно к касательной плоскости в точке x , проведенной в сторону наибольшего возрастания функции

Определение. Матрицей Гессе $H(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой в точке x функции $f(x)$ называется матрица частных производных второго порядка, вычисленных в данной точке.

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

1. $H(x)$ — симметричная, размер nn
2. Антиградиент: вектор, равный по модулю вектору градиента, но противоположный по направлению. Указывает в сторону наибольшего убывания функции $f(x)$
- 3.

$$\nabla f(x) = f(x + \Delta x) - f(x) = \nabla f(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H(x) \Delta x + o(\|\Delta x\|^2)$$

$o(\|\Delta x\|^2)$ — сумма всех членов разложения, имеющих порядок выше второго, $\Delta x^T H(x) \Delta x$ — квадратичная форма

6.1.1 Свойства квадратичных форм

Квадратичная форма $\Delta x^T H(x) \Delta x$ (и соответствующая матрица $H(x)$) называется:

- положительно определенной $H(x) > 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x > 0$
- отрицательно определенной $H(x) < 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x < 0$
- положительно полуопределенной $H(x) \geq 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x \geq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$
- отрицательно полуопределенной $H(x) \leq 0$, если $\forall \Delta x \neq 0 \Delta x^T H(x) \Delta x \leq 0$ и имеется $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$
- неопределенной, если $\exists \Delta x, \Delta \tilde{x} : \Delta x^T H(x) \Delta x > 0, \Delta \tilde{x}^T H(x) \Delta \tilde{x} < 0$
- тождественно равной нулю $H(x) \equiv 0$, если $\forall \Delta x \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$

6.1.2 Свойства выпуклых множеств и выпуклых функций

Определение. Пусть $x, y \in E_n$. Множество точек вида $\{z\} \subset E_n : z = \alpha x + (1 - \alpha)y, \alpha \in [0, 1], z$ — отрезок, соединяющий x и y .

Пример. $E_n : n \leq 3: z$ — отрезок(обычный)

Определение. $U \subset E_n$ выпуклое, если вместе с точками x и $y \in U$ оно содержит и весь отрезок $z = \alpha x + (1 - \alpha)y, \alpha \in [0, 1]$

Определение. Функция $f(x)$, заданная на выпуклом $U \subset E_n$ называется:

- выпуклой, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha \in [0, 1]$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$
- строго выпуклой, если $\forall \alpha \in (0, 1)$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) < \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$
- сильно выпуклой с константой $l > 0$, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha \in [0, 1]$ выполняется $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) - \frac{l}{2}\alpha(1 - \alpha)\|x - y\|^2$

Свойства:

1. Функция $f(x)$ выпуклая, если ее график целиком лежит не выше отрезка, соединяющего две ее произвольные точки
Функция $f(x)$ строго выпуклая, если ее график лежит целиком ниже отрезка, соединяющего две ее произвольные, но не совпадающие точки
2. Если функция $f(x)$ сильно выпуклая, то она одновременно строго выпуклая и выпуклая
Если функция $f(x)$ строго выпуклая, то она одновременно выпуклая
3. Выпуклость функции можно определить по матрице Гессе $H(x)$
 - Если $H(x) \geq 0 \forall x \in E_n$, то $f(x)$ выпуклая
 - Если $H(x) > 0 \forall x \in E_n$, то $f(x)$ строго выпуклая
 - Если $H(x) \geq lE \forall x \in E_n$, где E — единичная матрица, то $f(x)$ сильно выпуклая

Свойства выпуклых функций:

1. Если $f(x)$ выпуклая функция на выпуклом множестве U , то всякая точка локального минимума есть точка глобального минимума на U
2. Если выпуклая функция достигает своего минимума в двух различных точках, то она достигает минимума во всех точках отрезка, соединяющих эти точки.
3. Если $f(x)$ строго выпуклая функция множества U , то она может достигать своего глобального минимума на U не более чем в одной точке

6.1.3 Необходимое и достаточное условие безусловного экстремума

Теорема 6.1.1 (Необходимое условие экстремума первого порядка). Пусть $x^* \in E_n$ — локальный минимум или максимум $f(x)$ на E_n и $f(x)$ — дифференцируема в точке x^*

Тогда $\nabla f(x)$ в точке x^* равен нулю $\nabla f(x^*) = 0$, т.е.

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0, \quad i = \overline{1, n}$$

Определение. Точки $x^* : \nabla f(x^*) = 0$ — **стационарные**

Теорема 6.1.2 (Необходимое условие экстремума второго порядка). Пусть $x^* \in E_n$ — точка локального минимума или максимума $f(x)$ на E_n и $f(x)$ — дважды дифференцируемая в точке.

Тогда $H(x^*)$ — является положительно или отрицательно(если максимум) полуопределенной, т.е. $H(x^*) \geq 0$ или $H(x^*) \leq 0$ (если максимум)

Теорема 6.1.3 (Достаточное условие экстремума). Пусть $f(x)$ в $x^* \in E_n$ дважды дифференцируема, ее $\nabla f(x) = 0$, а $H(x^*) > 0$ или $H(x^*) < 0$ (для максимума).

Тогда x^* — точка локального минимума(максимума) $f(x)$ на E_n

1. Проверка выполнения условий

- вычисление угловых миноров $H(x)$
 - вычисление главных миноров $H(x)$
- (а) Исследование положительной или отрицательной определенности угловых и главных миноров
 - (б) Анализ собственных значений матрицы $H(x)$