Лекции по Методам оптимизации 4 семестр

Ilya Yaroshevskiy

24 марта 2021 г.

Оглавление

Лекция 1

Лекция 2

Лекции 1 и 2

2.1 Теория погрешности

Отклонение от теоретического решения Виды погрешности:

1. Неустранимая погрешность

   Пример. Физические величины, другие константы

2. Устранимая погрешнеость Связана с методом решения

   (a) Погрешность модели
   Связана с матиматической формулировкой задачи. Она плохо отображает реальную модель

   (b) Остаточная погрешность(Погрешнотъ 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 погрешость
  $\delta_X \geq \left|\frac{X^* - X}{|X|}\right|$ — 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 значащимицифрами 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 уиницы 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) $k = 0\ \frac{1}{2} \cdot 10^0 = \frac{1}{2} \geq \Delta a$

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

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

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

2.1.3 Распространение погрешности

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

$\sqrt{2}$

$$\frac{7}{5} = 1.4$$
$$\frac{17}{12} = 1.41666$$
$$\frac{707}{500} = 1.414$$
$$\sqrt{2} = 1.4142145624$$

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

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.

- $y = 70 - \sqrt{4899}$
  $\sqrt{4899} = 69.992\ldots$
  $\sqrt{4899} \approx 69.99$
  $y \approx 70 - 69.99 = 0.01$
  $$y = \frac{1}{70 + \sqrt{4899}}$$
  $\sqrt{4899} = 69.99;\ 70 + 69.99 = 139.99$
  $y = \frac{1}{140} = 0.00714285 \approx 0.007143$

2.2 Одномерная минимизация функций

2.2.1 Унимодальные функции

$f(x) \to \min,\ x \in U$
$f(x) \to \max \Rightarrow -f(x) \to min$
$x^* \in U$ — точка минимума: $f(x*) \leq f(x)\ \forall x \in U$
U^* — множество точек минимума
$\tilde{x} \in U : \exists V(\tilde{x})\ \forall x \in V\ \ f(\tilde{x}) \leq f(x)$ — локальный минимум

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

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

Примечание. Свойства:

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

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

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

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

   (a) x_1 и x_2; вычислить $f(x_1)$ и $f(x_2)$
   (b) $f(x_1)$ и $f(x_2)$
   - Если $f(x_1) \leq f(x_2) \to [a, x_2]$, т.е. $b = x_2$
   - Иначе $[x_1, b] \to [x_1, b]$, 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) $x^* \approx \overline{x} = \frac{a+b}{2} \quad f^* \approx f(\overline{x})$

   2.2 $\delta \in (0, 2\varepsilon)$
   Число итерций $n \geq \log_2 \frac{b-a-\delta}{2\varepsilon-\delta}$

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

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

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

3. Если $f(x_1) \le f(x_2)$, 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

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

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

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

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:

- $x_1 = a_n + \frac{F_1}{F_{n+1}}(b_0 - a_0)$
- $x_2 = a_n + \frac{F_2}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$

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

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

- $x_1, x_2, x_3 \in [a, b]$
- $x_1 < x_2 < x_3$
- $f(x_1) \geq f(x_2) \leq f(x_3)$

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

- $q(x_1) = f(x_1) = f_1$
- $q(x_2) = f(x_2) = f_2$
- $q(x_3) = f(x_3) = f_3$
- $a_0 = f_1$
- $a_1 = \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}$
- $a_2 = \frac{1}{x_3 - x_2}\left(\frac{f_3 - f_1}{x_3 - x_1} - \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1}\right)$

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

Лекция 4

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

$$\frac{l^i_{\text{з.с}}}{l^i_{\text{фиб.}}} \approx 1.17$$

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

Алгоритм

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

   $\to$ 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 $[a, b]$

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

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

Алгоритм

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

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

   $\to$ 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^*

$$F(x) = f'(x) \text{ — линеаризуем в корестнтсти } x_0$$

($\mathrm{x_0}$, f'($\mathrm{x_0}$)), 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 $x = x_1$:

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

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

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

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

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

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

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

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 $x_k \to x^*$. $x^* \approx x_k + p$

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

Главное преимущество метода Ньютона:

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

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

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:

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

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 пределе x^* монотонно, если:

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

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

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

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

Пример.

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

, пусть $|f'(x)| \leq 10^{-7}$

```
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	$9 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-8}$	...

Выолнилось 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

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

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

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

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

   , 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 произвдной 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 — эвклидово пространство размера n. $f(x^*) = \min_{x \in U} f(x)$. Если ствится задача найти максимум, то млжно перейти к поиску минимума: $f(x^*) = \max_{x \in U} f(x) = -\min_{x \in U}(-f(x))$

2. $f(x^*) = \mathrm{extr}_{x \in U} f(x)$

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. $f(x) = \mathrm{const}$

Определение. Градиентом ∇ f(x) непрерывно жифференцируемой 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.

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

1. $H(x)$ — симметричная, размер nn
2. Антиградиент: вектор, равный по модулю вектору градиента, но противоположный по направлению. Указывает в сторну 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 соответсвующая матрица $H(x)$) называется:

- положительно опрделенной $H(x) > 0$, 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 $\Delta x \neq 0 : \Delta x^T H(x) \Delta x = 0$
- неопределнной, если $\exists \Delta x, \Delta \tilde{x} : \Delta x^T H(x) \Delta x > 0,\ \Delta \tilde{x}^T H(\tilde{x}) \Delta \tilde{x} < 0$
- 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 ∈ U) оно содержит и весь отрезок $z = \alpha x + (1-\alpha)y, \alpha \in [0,1]$

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

- выпуклой, если $\forall x, y \in U$ и $\forall \alpha [0,1]$ 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 грфик 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 одноверменно 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 миниума во всех точках отрезка, соединяющих это 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.

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

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 диференцируемая 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 $H(x)$

   (a) Исследование положительной или отрицательной определнности угловых и главных миноров

   (b) Анализ собственных значений матрицы $H(x)$

Лекция 7

7.1 Критерии Сильвестра

7.1.1 Достаточный условия

1. $H(x^*) > 0$ и x^* — локальный минимум $\Leftrightarrow \Delta_1 > 0, \Delta_2 > 0, \ldots, \Delta_n > 0$
2. $H(x^*) < 0$ и x^* — локальный максимум $\Leftrightarrow \Delta_1 < 0, \Delta_2 > 0, \ldots, (-1)^n \Delta_n > 0$

, где Δ_i — угловой минор

7.1.2 Необходимые условия

1. $H(x^*) \geq 0$ и x^* — может быть локальный минимум $\Leftrightarrow \Delta_1 \geq 0, \Delta_2 \geq 0, \ldots, \Delta_n \geq 0$
2. $H(x^*) \leq 0$ и x^* — может быть локальный максимум $\Leftrightarrow \Delta_1 \leq 0, \Delta_2 \geq 0, \ldots, (-1)^n \Delta_n \geq 0$

, где Δ_i — главный минор

7.2 Собственные значения

Определение. Собственные значения λ_i $(i = 1..n)$ $H(x^*)_{n \times n}$ находятся как корни характеристического уравнения $|H(x^*) - \lambda E| = 0$. Если $H(x)$ — вещественная, симметричная матрица, то λ_i — вещественные

7.3 Общие прицнипы многмерной оптимизации

7.3.1 Выпуклые квадратичные функции

$$f(x) = \frac{1}{2}ax^2 + bx + c$$

Определение. Функция вида

$$f(x) = \sum^{n} i = 1 \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j + \sum_{j=1}^{n} b_jx_j + c \tag{7.1}$$

Называется **квадратичной функией n перменных**

Положим $a_{ij} = a_{ij} + a_{ji}$?? $\Rightarrow$ симметрия. матрица A

$$f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c$$

, где $b = (b_1, \dots b_n)^T \in E_n$ — вектор коэффицентов, $x = (x_1, \dots, x_n)^T$. x, y — скалярное произведение Свойства квадратичных функций:

1. $\nabla f(x) = Ax + b$

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j + \sum_{j=1}^{n} b_jx_j + c\right) =$$

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(a_{ik} + a_{ki})x_i + b_k = \sum_{i=1}^{n} a_{ki}x_i + b_k$$

2. $H(x) = A$, где $H(x)$ — Гессиан???

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_l \partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right) = \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ki}x_i + b_k\right)$$

3. Квадратичная функция $f(x)$ с положительно определенной матрицей A сильно выпукла

$$A = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{vmatrix}$$

$$A - lE = \begin{vmatrix} \lambda_1 - l & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 - l & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n - l \end{vmatrix}$$

В этом базисе все угловые миноры матрцы A и матрицы $A - lE$ — положительны при достаточно малом $l : 0 < l < \lambda_{\min \Rightarrow f(x)}$ — сильно выпукла

7.3.2 Принципы многмерной оптимизации

$$f(x) \to \min,\ x \in E_n$$
$$x^{k+1} = \Phi(x^k, x^{k+1}, \dots x)^0,\ x^0 \in E_n \tag{7.2}$$

— итериционная процедура(общего вида)

$\{x^k\}$**:**

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f^* = \min_{E_n} f(x),\ \text{если } U^* \neq \emptyset$$
$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f^* = \inf_{E_n} f(x),\ \text{если } U^* = \emptyset$$

, где U^* – множестве точек глобального минимума функции $f(x)$
$\{x^k\}$+ условие 7.2 = минимизирующая последовательность для $f(x)$
Если для $U^* \neq \emptyset$ выполняется условие

$$\lim_{k\to\infty} \rho(x^k, U^*) = 0$$

, то x^k сходится к множеству U^*. Если U^* содежит единственную точку x^*, то для $\{x^k\}$ сходящейся к U^* будет справедливо $\lim_{k\to\infty} x^k = x^*$

Определение. $\rho(x, U) = \inf_{y\in U} \rho(x, y)$ — растояние от точки x до множества U

Примечание. Минимизирующая последовательность $\{x^k\}$ может и не сходится к точке минимума

Теорема 7.3.1 (Вейерштрасса)**.** Если $f(x)$ непрерывна в E_n и множество $U^\alpha = x : f(x) \leq \alpha$ для некоторого α непусто и ограничено, то $f(x)$ достигает глобального минимума в E_n

1. Скорость сходимости(минизирующих последовательностей)

   Определение. $\{x^k\}$ сходится к точке x^* **линейно** (со скоростью геометрической последовательности), если $\exists q \in (0, 1)$:

   $$\rho(x^k, x^*) \leq q\rho(x^{k-1}, x^*) \tag{7.3}$$
   $$\rho(x^k, x^*) \leq q^k\rho(x^0, x^*)$$

   Определение. Сходимость называется **сверхлинейной** если

   $$\rho(x^k, x^*) \leq q_k\rho(x^{k-1}, x^*)$$

   , и $q_k \xrightarrow[k\to\infty]{} +0$

   Определение. Квадратичная сходимость:

   $$\rho(x^k, x^*) \leq \left[c\rho(x^{k-1}, x^*)\right]^2,\ c > 0$$

2. Критерии окончания итерационного процесса

$$
\begin{gathered}
\rho(x^{k+1}, x^*) < \varepsilon_1 \\
|f(x^{k+1}) - f(x^k)| < \varepsilon_2 \\
\|\nabla f(x^k)\| < \varepsilon_3
\end{gathered} \tag{7.4}
$$

, где ε_i — заранее заданные точности

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k,\ \ k = 0, 1, \dots \tag{7.5}$$

, где p^k — направление поиска из x^k в x^{k+1}, α_k — величина шага

$$f(x^{k+1}) < f(x^k)$$

— условие выбора α_k

Определение. В итерационном процессе 7.5 производится **исчерпывающий спуск**, если величина шага α_k находится из решения одномерной задачи минизации:

$$\Phi_k(\alpha) \to \min_{\alpha},\ \ \Phi_k(\alpha) = f(x^k + \alpha p^k) \tag{7.6}$$

Теорема 7.3.2. Если функция $f(x)$ дифференцируема в пространстве E_n, то в итерационном процессе 7.5 с выбором шага с ичерпывающим спуском для любого $k \geq 1$:

$$(\nabla f(x^{k+1}), p^k) = 0 \tag{7.7}$$

— это значит что эти два вектора ортогональны

для $\Phi_k(\alpha)$ необходимое условие минимума функции:

$$\frac{d\Phi_k(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f(x^{k+1})}{\partial x_j} \cdot \frac{dx_j^{k+1}}{d\alpha} = 0$$

учитывая $x_j^{k+1} = x_j^k + \alpha p_j^k \Rightarrow \frac{dx_j^k}{d\alpha} = p_j^k$

Теорема 7.3.3. Для квадратичной функции $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) + (b, x) + c$ величина α_k исчерпывающего спуска в итерационном процессе

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, =0, 1, \dots$$

равна

$$\alpha_k = -\frac{(\nabla f(x^k), p^k)}{(Ap^k, p^k)} = -\frac{(Ax^k + b, p^k)}{(Ap^k, p^k)} \tag{7.8}$$

Лекция 8

TODO

Лекция 9

9.1 Метод сопряженных градиентов

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \tag{9.1}$$
$$p^k = -\nabla f(x^*)$$

Направление убывания может носить зигзагообразный характер. Будем находить вектор p^k не только через антиградиент, но и через p^{k-1}.

$$p^{k+1} = -\nabla(x^{k+1}) + \beta_k p^k \tag{9.2}$$

β_k выбираются так, чтобы получалась последовательность A-ортогональных векторов $p^0, p^1, \dots$. Из условия:

$$(Ap^{k+1}, p^k) = 0$$

$$\beta_k = \frac{(A\nabla f(x^{k+1}), p^k)}{(Ap^k, p^k)} \tag{9.3}$$

Для квадратичных функция:

$$\alpha_k = -\frac{(\nabla f(x^k), p^k)}{(Ap^k, p^k)} \tag{9.4}$$

Утвержение: итерационный процесс, который описывается формулами 9.1, 9.2, 9.3, 9.4, с положительно определенной симметричной матрицей A дает точки $x^0, \dots, x^k$ и векторы, такие что если $\nabla f(x^i) \neq 0$, $0 \leq i < k \leq n-1$, то векторы $p^0, \dots, p^k$ — A-ортогональны, а градиенты $\nabla f(x^0), \dots, \nabla f(x^i)$ — взаимно ортогональны.

Т.к. p^k в 9.2 A-ортогональны, то метод гарантирует нахождение точки минимума сильно выпуклой квадратичной функции не более чем за n шагов

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \quad x^0 \in E_k \quad p^0 = -\nabla f(x^0) \tag{9.5}$$

$$f(x^k + \alpha_k p^k) = \min_{\alpha > 0} f(x^k + \alpha p^k) \quad k = 0, 1, \dots \tag{9.6}$$

$$p^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k p^k \quad k = 0, 1, \dots \tag{9.7}$$

$$\beta_k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2} \tag{9.8}$$

Точное определение α_k возможно только в редких случаях, т.к. p^k могут быть не A-ортогональными. В этом методе используется следующий практический прием: через N шагов производится обновление метода, т.е. $\beta_{m\cdot N} = 0 \quad m = 1, 2, \ldots$, где $m \cdot N$ — момент обновления метода(рестарта), часто полагают $N = n$ — размерность пространства E_n. Ретарт необходим для устранения накопленной погрешности метода, из-за которой вектора p^k перестанут указывать на направление убывания функции $f(x)$

Если функция хорошо апроксимируется квадратичной функции, то метод сопряженных градиентов даст маленькое количество шагов

9.2 Метод стохастического градиентного спуска

Этот метод по большей части связан с большими выборками. Обычные методы пострадают, из-за дорогого вычисления функции на большом наборе данных.

Наборы разбивают на K тренировочных наборов, части тренировочных наборов размера M называют minibatch. Тогда набор можно предсавить как:

$$X^{(k)} = \{x_i | i = M_k, \ldots, (M_k + M - 1)\}$$

$$Y^{(k)} = \{y_i | i = M_k, \ldots, (M_k + M - 1)\}$$

Определяют некоторую функцию, которую будем оптимизировать. Для каждого набора она будет выглядеть так:

$$L^{(k)}(\omega) = \sum_{i=0}^{M} L(\omega, x_{M_k+i}, y_{M_k+i}) \quad k = 0, \ldots, (K-1)$$

, где ω — точк минимума

Когда определяем функцию для каждого набора, каждая составляющая ω будет находится на мини итерации:

$$\omega_p^{(k+1)} = \omega_p^{(k)} - \eta \cdot \nabla L^{(k)}(\omega_p^{(k)}) \quad k = 0, \ldots, (K-1)$$

$$\omega_{p+1}^{(0)} = \omega_p^{(k)}$$

Большая итерация: $p = 0, 1, \ldots$ завершается когда проходим весь набор миниитераций. Такая большая итерация называется эпохой. Когда переходим к следующей эпохе, перемешивает тренировочный набор. В результате пермешивания, элементы будут попадать в разные minibatch'и на каждой эпохе.

9.2.1 Adagrad (модификация)

Предлагается использовать разные η, для каждого minibatch'a.

$$\eta_p = (\eta_p^{(1)}, \ldots, \eta_p^{(d)})$$

$$\eta_0 = \text{const} \quad \eta_0^{(i)} = \eta \quad i = 1, \ldots, d$$

$$\omega_p = (\omega_p^{(1)}, \ldots, \omega_p^{(d)})$$

$$\nabla L(\omega_p) = (g_p^{(1)}, \ldots, g_p^{(d)})$$

Определим вспомогательный вектор:

$$G_p^{(i)} = (G_p^{(1)}, \ldots, G_p^{(d)})???$$

$$G_p^{(i)} = \sum_{j=1}^{p} (g_i^{(i)})^2 \quad i = 1, \ldots, d$$

$$\eta_p^{(i)} = \frac{\eta}{\sqrt{G_p^{(i)} + e}}$$

, где e — коэффицент $\sim 1e-8$

$$\omega_{p+1} = \omega_p - \eta_p \odot L(\omega_p)$$

, где $\odot$ — поэлементное умножение двух векторов

9.3 Метод покоординатного спуска

$$f(x) \to \min_{x \in E_n}$$

Алгоритм:

- Выбираем вектор $x_0 \in E_n$

$\forall i$:

1. фиксируем значение всех перменных, кроме x_i
2. $f(x_i) \to min$ любым методом одномерной оптимизации(золотое сечение наиболее популярный)
3. Проверка выполнения критерия останова:
   - $\|x^{k+1} - x^k\| \le \varepsilon_1$
   - $\|f(x^{k+1}) - f(x^k)\| \le \varepsilon_2$