Optimizavimo metodai

Vienmatis optimizavimas

Vieno kintamojo funkcijos optimizavimas

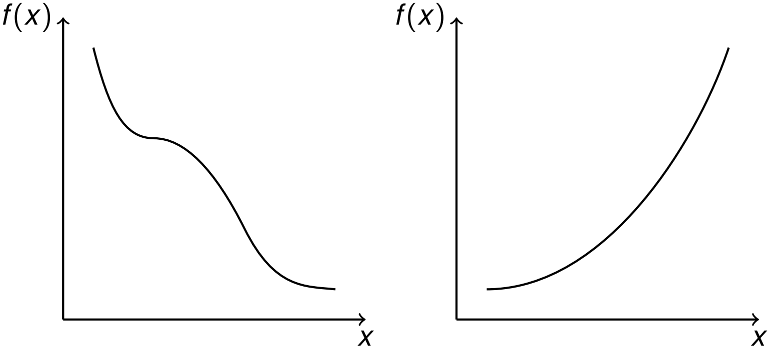
- Šioje paskaitoje nagrinėsime vieno kintamojo funkcijų $f(x) : \mathbb{R} \leftarrow \mathbb{R}$ optimizavimą, intervale $A \subset \mathbb{R}$.
- Vienmatė paieška – neatsiejama daugelio kintamųjų funkcijų optimizavimo metodų sudedamoji dalis.
- Taškas x^* vadinamas funkcijos $f(x)$ globaliojo minimumo tašku, jei $f(x^*) \leq f(x)$, $x \in A$.
- Taškas x^* vadinamas funkcijos $f(x)$ lokaliojo minimumo tašku, jei egzistuoja tokia x^* aplinka $S(x^*)$, kad $f(x^*) \leq f(x)$, $x \in S(x^*)$.
- Vieno kintamojo optimizavimo uždavinių pavyzdžiai:

$$f(x) = x^2 + 2x + 7,\ x \in A = \mathbb{R};$$

$$f(x) = 2x^2 + x + 1,\ x \in A = \{x :\ -5 \leq x \leq 5\}.$$

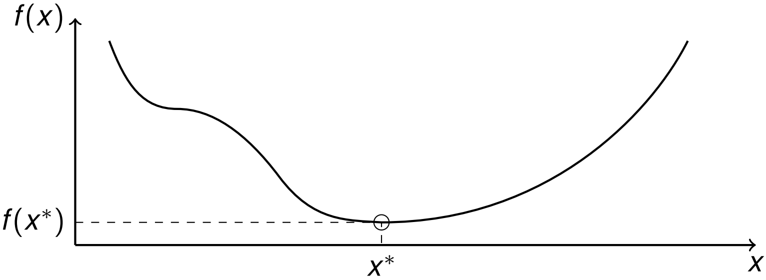
Monotoniškumas

- Jei bet kuriems dviems taškams x ir y iš srities A, tokiems, kad $x \leq y$, galioja $f(x) \geq f(y)$, tai funkcija yra monotoniškai mažėjanti, o jei $f(x) \leq f(y)$, tai funkcija yra monotoniškai didėjanti srityje A.



Unimodali funkcija

- Funkcija $f(x)$ yra unimodali intervale A tada ir tik tada, jei ji monotoniška abipus vienintelio šiame intervale minimumo taško x^*.
- Kitaip tariant, x^* yra vienintelis $f(x)$ minimumo taškas intervale A ir $f(x)$ yra unimodali šiame intervale tada ir tik tada, kai taškams x ir y iš $x^* \leq x \leq y$ išplaukia, kad $f(x^*) \leq f(x) \leq f(y)$, o iš $x^* \geq x \geq y$ išplaukia, kad $f(x^*) \leq f(x) \leq f(y)$.



Vieno kintamojo funkcijos skleidimas Teiloro eilute

- Tarkime vieno kintamojo funkcija $f(x)$ apibrėžta atvirame intervale A ir šiame intervale $n+1$ kartą diferencijuojama.
- Jei $x^* \in A$ ir $(x^* + \varepsilon) \in A$, tuomet pagal Teiloro teoremą, taške $(x^* + \varepsilon)$ funkciją galime išskleisti Teiloro sprendiniu

$$f(x^*+\varepsilon) = f(x^*)+\varepsilon f'(x^*)+\frac{\varepsilon^2}{2!}f''(x^*)+\cdots+\frac{\varepsilon^n}{n!}f^{(n)}(x^*)+O_{n+1}(\varepsilon),$$

$$O_{n+1}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(x^* + \theta\varepsilon),$$

čia $0 < \theta < 1$, $O_{n+1}(\varepsilon)$ – skleidinio paklaida, proporcinga ε^{n+1}; mažindami ε galime kiek norime sumažinti $O_{n+1}(\varepsilon)$.

Vieno kintamojo funkcijos optimumo identifikavimas

- Jei x^* yra lokaliojo minimumo taškas intervale A, tada turi egzistuoti tam tikra taško x^* ε-aplinka, kurios visiems taškams $x \in [x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$ galioja

$$f(x) \geq f(x^*).$$

- Iš to išplaukia, jog

$$\varepsilon f'(x^*) + \frac{\varepsilon^2}{2!} f''(x^*) + \cdots + \frac{\varepsilon^n}{n!} f^{(n)}(x^*) + O_{n+1}(\varepsilon) \geq 0.$$

- Jei ε mažas, didžiausią įtaką turi pirmasis narys. ε gali būti ir teigiamas, ir neigiamas, todėl ši nelygybė bus tenkinama, tik kai

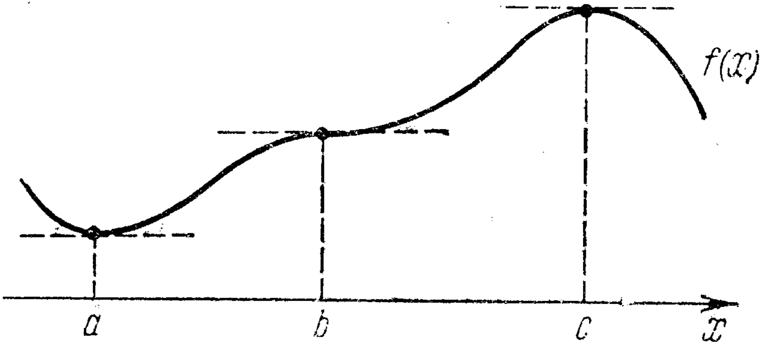
$$f'(x^*) = 0.$$

- Analogiškai mąstant, nelygybė bus tenkinama tik kai

$$f'(x^*) = 0 \text{ ir } f''(x^*) \geq 0.$$

Būtina minimumo sąlyga

- Jei x^* yra $f(x)$ lokaliojo minimumo taškas, tai
$$f'(x^*) = 0.$$
- Geometriškai gradiento lygybės nuliui sąlyga reiškia, kad lokaliojo minimumo taške funkcijos liestinė yra ortogonali funkcijos reikšmių ašiai.
- Būtina minimumo sąlyga nėra pakankama.



Pakankamos minimumo sąlygos

- Jei funkcija $f(x)$ dukart diferencijuojama taške x^* ir $f'(x^*) = 0$, $f''(x^*) > 0$, tai taške x^* funkcija turi lokalųjį minimumą.
- Jei funkcija $f(x)$ dukart diferencijuojama taške x^* ir $f'(x^*) = 0$, $f''(x^*) < 0$, tai taške x^* funkcija turi lokalųjį maksimumą.
- Tarkime $f(x)$ yra n kartų diferencijuojama taške x^*. Tegul $f^{(\nu)}(x^*) = 0$, kai $\nu = 1, \ldots, n-1$, o $f^{(n)}(x^*) \neq 0$. Jei n lyginis, tai $f(x)$ taške x^* turi minimumą, jei $f^{(n)}(x^*) > 0$, arba maksimumą, jei $f^{(n)}(x^*) < 0$. Jei n nelyginis – ekstremumo nėra.

Pavyzdys, kai funkcija neturi minimumo

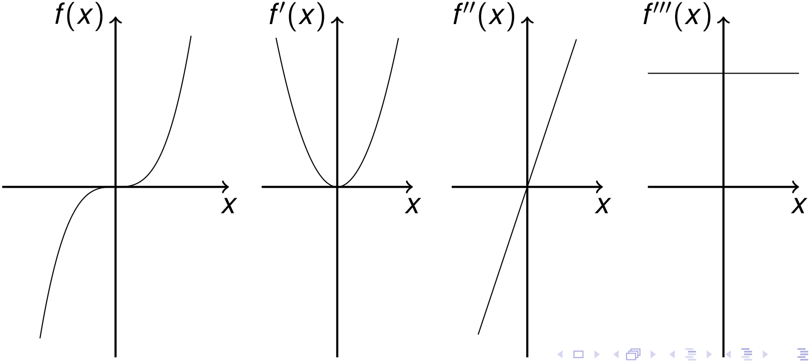
- Panagrinėkime funkciją $f(x) = x^3$.

$$f'(x) = 3x^2,\ f'(0) = 0;$$

$$f''(x) = 6x,\ f''(0) = 0;$$

$$f'''(x) = 6,\ f'''(0) = 6;$$

- Vadinasi funkcija $f(x) = x^3$ ekstremumo neturi.



Analitinis optimizavimo uždavinio sprendimas

- Pavyzdys. Raskite funkcijos $f(x) = -x^3 + 3x^2 + 9x + 10$ minimumą srityje $A = \{x : -2 \leq x \leq 4\}$.
- Apskaičiuojame funkcijos $f(x)$ pirmosios eilės išvestinę, prilyginame ją nuliui ir randame stacionariuosius taškus.
- $f'(x) = -3x^2 + 6x + 9 = 0$, gauname du stacionariuosius taškus $x = 3$ ir $x = -1$. Abu šie taškai priklauso sričiai A.
- Palyginame tikslo funkcijos reikšmes stacionariuosiuose taškuose ir intervalo galuose.

$$f(-2) = 12;$$

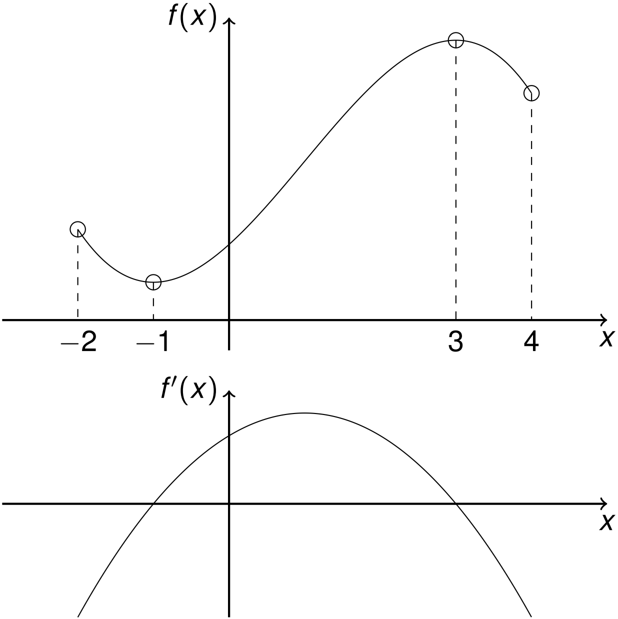
$$f(-1) = 5;$$

$$f(3) = 37;$$

$$f(4) = 30.$$

- Atsakymas: $\min f(x) = 5$, kai $x^* = -1$.

Optimizavimo uždavinio iliustracija



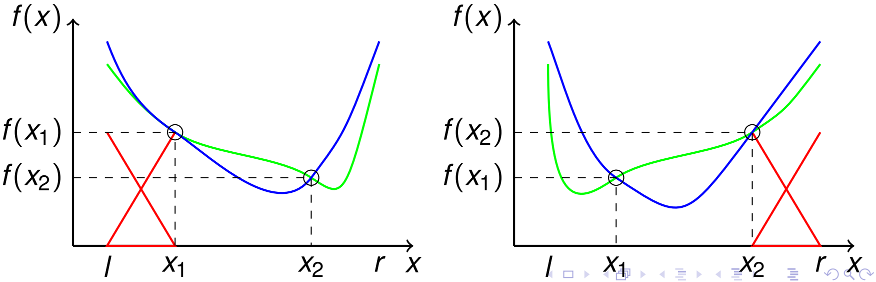
Intervalų atmetimo metodai

- Intervalų atmetimo metodų paskirtis – rasti minimumo tašką duotame intervale.
- Šie metodai – tai vienmatės paieškos metodai, kuriais funkcijos minimumas randamas atmetant paieškos intervalų pointervalius. Taip su kiekvienu metodo žingsniu paieškos intervalas (sritis) siaurėja.
- Reikalavimas funkcijai yra unimodalumas – vienas minimumas.

Intervalų atmetimo metodų pagrindimas

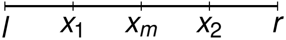
- Tarkime, funkcija $f(x)$ yra unimodali uždarame intervale $l \leq x \leq r$, o jos minimumas yra taške x^*. Nagrinėsime tokius taškus x_1 ir x_2, kad $l \leq x_1 \leq x_2 \leq r$. Lyginant funkcijos reikšmes šiuose taškuose galimos tokios išvados:

1. jei $f(x_1) > f(x_2)$, tai intervale $[l, x_1)$ funkcijos $f(x)$ minimumo nėra, t.y. $x^* \in [x_1, r]$;
2. jei $f(x_1) < f(x_2)$, tai $f(x)$ minimumas ne intervale $(x_2, r]$, t.y. $x^* \in [l, x_2]$;
3. jei $f(x_1) = f(x_2)$, tai galima atmesti abu intervalus $[l, x_1)$ ir $(x_2, r]$, t.y. $x^* \in [x_1, x_2]$.

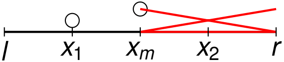


Intervalo dalijimo pusiau metodas

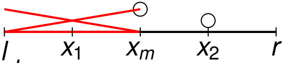
$$\min_{x \in [l, r]} f(x).$$



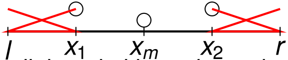
- Pradiniame intervale parenkami trys tolygiai pasiskirstę bandymo taškai x_m, x_1 ir x_2.
  1. $x_m = (l + r)/2$, $L = r - l$, skaičiuojame $f(x_m)$;
  2. $x_1 = l + L/4$, $x_2 = r - L/4$, skaičiuojame $f(x_1)$ ir $f(x_2)$;
  3. jei $f(x_1) < f(x_m)$, tai:

     3.1 atmetamas $(x_m, r]$ atliekant keitimą $r = x_m$;
     3.2 intervalo centru tampa x_1, tad keičiamas $x_m = x_1$;
     3.3 einama į 6 punktą
  4. jei $f(x_2) < f(x_m)$, tai:

     4.1 atmetamas $[l, x_m)$ atliekant keitimą $l = x_m$;
     4.2 intervalo centru tampa taškas x_2, tad keičiama $x_m = x_2$;
     4.3 einama į 6 punktą
  5. priešingu atveju

     5.1 atmetami intervalai $[l, x_1)$ ir $(x_2, r]$ atliekant keitimus $l = x_1$ ir $r = x_2$;
  6. skaičiuojamas $L = r - l$; jei L pakankamai mažas ($L < \varepsilon$), baigiame skaičiavimus, jei ne – einame į 2 punktą.

Intervalo dalijimo pusiau metodo pastabos

- Kiekvienos iteracijos metu atmetama pusė intervalo.
- Gauto intervalo vidurinis taškas visuomet lieka vienu iš bandymo taškų x_1, x_2 arba x_m, gautų ankstesne iteracija.
- Atlikus N tikslo funkcijų reikšmių skaičiavimų gauto intervalo ilgis sudaro $(1/2)^{(N-1)/2}$ pradinio intervalo dalį.
- Iš visų intervalo dalijimo į lygias dalis metodų (dvitaškio, tritaškio, keturtaškio ir t.t.) pati efektyviausia tritaškė paieška, arba intervalo dalijimo pusiau metodas.

Intervalo dalijimo pusiau metodo pavyzdys

- $\min_{60 \le x \le 150} f(x) = (100 - x)^2$.
- 1 iteracija: $l = 60$; $r = 150$; $L = 90$; $x_m = 105$.

$$x_1 = l + L/4 = 60 + (90/4) = 82{,}5;$$

$$x_2 = r - L/4 = 150 - (90/4) = 127{,}5;$$

$$f(82{,}5) = 306{,}25 \;>\; f(105) = 25;$$

$$f(127{,}5) = 756{,}25 \;>\; f(105) = 25.$$

  Atmetami $[60; 82{,}5)$ ir $(127{,}5; 150]$. Intervalas sutrumpėja nuo 90 iki 45.
- 2 iteracija: $l = 82{,}5$; $r = 127{,}5$; $L = 45$; $x_m = 105$;

$$x_1 = 82{,}5 + (45/4) = 93{,}75;\; x_2 = 127{,}5 - (45/4) = 116{,}25;$$

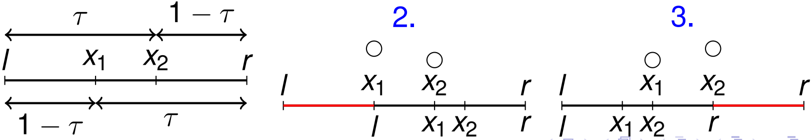
$$f(93{,}75) = 39{,}06 > f(105) = 25;$$

$$f(116{,}25) = 264{,}06 > f(105) = 25;$$

  Naujas intervalas yra $[93{,}75; 116{,}25]$, jo ilgis 22,5.

Auksinio pjūvio algoritmas

- Intervale du bandymo taškai, vienodai nutolę nuo vidurio.
- Atmetama santykinai ta pati intervalo dalis.
- Skaičiuojama viena tikslo funkcijos reikšmė iteracijoje.
  1. $L = r - l$, $x_1 = r - \tau L$ ir $x_2 = l + \tau L$, skaičiuojame $f(x_1)$ ir $f(x_2)$;
  2. jei $f(x_2) < f(x_1)$, tai:
     - 2.1 atmetamas $[l, x_1)$ atliekant keitimą $l = x_1$, $L = r - l$;
     - 2.2 kairiuoju tašku tampa ankstesnis dešinysis taškas $x_1 = x_2$;
     - 2.3 naujasis dešinysis taškas $x_2 = l + \tau L$, skaičiuojame $f(x_2)$;
  3. priešingu atveju:
     - 3.1 atmetamas $(x_2, r]$ atliekant keitimą $r = x_2$, $L = r - l$;
     - 3.2 dešiniuoju tašku tampa ankstesnis kairysis taškas $x_2 = x_1$;
     - 3.3 naujasis kairysis taškas $x_1 = r - \tau L$, skaičiuojame $f(x_1)$;
  4. jei L pakankamai mažas ($L < \varepsilon$), skaičiavimus baigiame, jei ne – einame į 2 punktą.



Fibonačio skaičius

- Po pirmos iteracijos intervalas sumažės ilgiu $1-\tau$ ir liks lygus τ.
- Atmetamo intervalo santykis su paieškos intervalu turi būti pastovus.
- Po pirmo bandymo santykis lygus $\frac{1-\tau}{1}$.
- Po pirmos iteracijos santykis lygus $\frac{\tau-(1-\tau)}{\tau}$.
- Turi galioti lygybė $\frac{1-\tau}{1} = \frac{\tau-(1-\tau)}{\tau}$.
- Iš čia išplaukia $\tau - \tau^2 = 2\tau - 1$, $\tau^2 = 1 - \tau$, $\tau = (-1 \pm \sqrt{5})/2$.
- Teigiamas $\tau = 0{,}61803...$ yra Fibonačio skaičius.
- Po pirmo tikslo funkcijos skaičiavimo su kiekvienu kitu skaičiavimu galima atmesti pointervalį, kurio ilgis sudaro $(1-\tau)$ dalį paieškos intervalo. Jei pradinio intervalo ilgis lygus 1, tai po N skaičiavimų paieškos intervalas taps lygus τ^{N-1}.

Auksinio pjūvio metodo pavyzdys

- $\min_{60 \leq x \leq 150} f(x) = (100 - x)^2$.
- Pereikime prie vienetinio intervalo įsivesdami kintamąjį w:

$$w = \frac{x - 60}{150 - 60} = \frac{x - 60}{90}, x = 90w + 60.$$

- $\min_{0 \leq w \leq 1} f(w) = (40 - 90w)^2$.
- 1 iteracija: intervalas $W_1 = [0; 1]$, jo ilgis $L_1 = 1$. Skaičiuosime tikslo funkciją dviejuose taškuose:

$$w_1 = 1 - \tau = \tau^2 = 0{,}382;\ f(w_1) = 31{,}6.$$

$$w_2 = \tau = 0{,}618;\ f(w_2) = 244{,}0;$$

$f(w_1) < f(w_2)$ ir $w_1 < w_2$, todėl intervalas $(w_2, 1]$ atmetamas.

Auksinio pjūvio metodo pavyzdys

- 2 iteracija: $W_2 = [0; 0{,}618]$, jo ilgis $L_2 = 0{,}618 = \tau$. Iš ankstesnės iteracijos turime $w_1 = 1 - \tau = \tau^2 = 0{,}382$; $f(w_1) = 31{,}6$.

  $$w_3 = \tau - \tau^2 = \tau(1 - \tau) = 0{,}236; \ f(w_3) = 352.$$

  $f(w_3) > f(w_1)$ ir $w_3 < w_1$, todėl intervalas $[0, w_3)$ atmetamas.

Auksinio pjūvio metodo pavyzdys

- 3 iteracija: $W_3 = [0{,}236; 0{,}618]$; $L_3 = 0{,}382 = \tau^2$. Iš anksčiau turime $w_1 = 1 - \tau = \tau^2 = 0{,}382$; $f(w_1) = 31{,}6$.
- Naujas taškas dedamas atstumu τL_3 nuo kairės intervalo W_3 pusės arba atstumu $(1 - \tau)L_3$ nuo dešinės.

  $$w_4 = 0{,}618 - (1 - \tau)L_3 = 0{,}618 - \tau^2 L_3 = 0{,}618 - \tau^4 = 0{,}472;$$

  $$f(w_4) = 6{,}15.$$

  $f(w_4) < f(w_1)$ ir $w_4 > w_1$, todėl intervalas $[0{,}236; 0{,}382)$ atmetamas.
- Gauname: $0{,}382 \leq w \leq 0{,}618$ ir iš čia $94{,}4 \leq x \leq 115{,}6$.
- Atlikta $N = 4$ skaičiavimai. Intervalo ilgis $\tau^{N-1} = \tau^3 = 0{,}618 - 0{,}382 = 0{,}236$, atitinkantis pradinio uždavinio intervalo ilgį 21,2.

Auksinio pjūvio metodo apibendrinimas

- Jei r yra dešinė, o l – kairė intervalo pusė, tai tolesnis bandymo taškas gaunamas pagal formules $w = r - \tau^N$ arba $w = l + \tau^N$, priklausomai kuris pointervalis buvo atmestas ankstesnėje iteracijoje – kairysis ar dešinysis.
- Jei atmestas kairysis pointervalis, reikės taško arčiau dešinės, o jei dešinysis, tai arčiau kairės.
- Sustojimo sąlyga:
  - pagal fiksuotą funkcijos bandymų skaičių;
  - pagal paieškos intervalo ilgį.

Intervalo siaurinimo metodų efektyvumas

- Pažymėkime pradinio intervalo ilgį L_1, o intervalo ilgį atlikus N funkcijos reikšmių skaičiavimų – L_N.
- Santykinis intervalo mažėjimo rodiklis

$$FR(N) = \frac{L_N}{L_1}.$$

- Jei $L_1 = 1$, tai atlikus N bandymų, intervalo ilgis bus:
  - skaičiuojant dalijimo pusiau metodu – $L_N = 0{,}5^{(N-1)/2}$.
  - skaičiuojant auksinio pjūvio metodu – $L_N = 0{,}618^{N-1}$.

$$FR(N) = \begin{cases} 0{,}5^{\frac{(N-1)}{2}} & \text{– dalijimo pusiau metodu,} \\ 0{,}618^{N-1} & \text{– auksinio pjūvio metodu,} \\ \frac{2}{N+1} & \text{– tolygios paieškos metodu.} \end{cases}$$

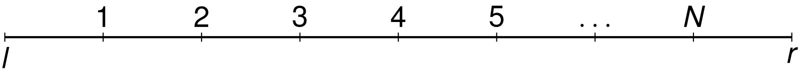
Tolygi paieška

- Paiešką vadiname tolygia, jei bandymai atliekami vienodai vienas nuo kito nutolusiuose taškuose.
- Intervalas dalijamas į $N + 1$ vienodų intervalų, kurių ilgis lygus $L_1/(N + 1)$.
- Tarkime, x^* – geriausias iš bandymo taškų. Optimumo taškas bus intervale

$$\left[x^* - \frac{L_1}{N+1}, x^* + \frac{L_1}{N+1}\right].$$

- Iš čia

$$L_N = \frac{2L_1}{N+1}.$$



Santykiniai intervalo mažėjimo rodikliai

- Lentelėje pateikiamas trijų metodų santykinio intervalo mažėjimo rodiklis atlikus N funkcijos reikšmių skaičiavimų.
- Iš lentelės matome, kad auksinio pjūvio metodu gaunamas greičiausias santykinis pradinio intervalo mažėjimas.

Metodas	$N = 3$	$N = 5$	$N = 10$	$N = 15$	$N = 20$
1. Dalijimas pusiau	0,500	0,250	0,044	0,008	0,0014
2. Auksinis pjūvis	0,382	0,146	0,013	0,001	0,0001
3. Tolygi paieška	0,500	0,333	0,182	0,125	0,0952

Niutono metodas

- Remdamiesi būtinosiomis minimumo sąlygomis, galime uždavinį spręsti netiesiogiai, pakeisdami jį lygties $f'(x) = 0$ sprendimu.
- Niutono metodas yra vienas iš klasikinių metodų lygčių sistemoms spręsti. Kairiosiose lygčių sistemos pusėse esančios funkcijos ištiesinamos taške X_i ir, išsprendus tiesinę lygčių sistemą, turėtasis taškas pakeičiamas tiesinės lygčių sistemos sprendiniu X_{i+1}.
- Norėdami realizuoti šią idėją ir ištiesinti išvestinės funkciją, pasinaudosime tikslo funkcijos $f(x)$ Teiloro eilutės nariais iki antrosios eilės:

$$f'(x) \approx f'(x_i) + f''(x_i) \cdot (x - x_i).$$

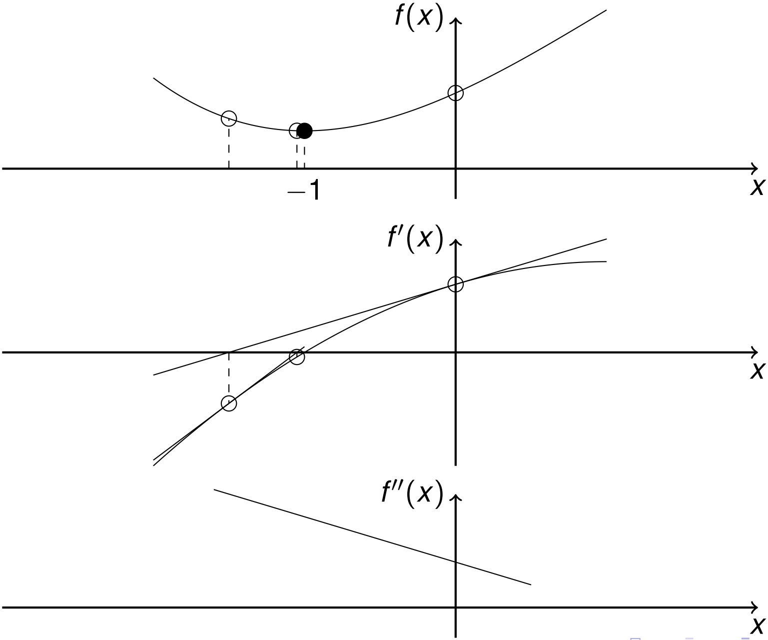
Prilyginę nuliui, gausime iteracinę metodo formulę

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)}.$$

Niutono metodo interpretacija

- Iteracine formule išreiškiamas tikslo funkcijos $f(x)$ kvadratinės aproksimacijos minimumo taškas.
- Taške x_i tikslo funkcija aproksimuojama Teiloro eilute, įvertinant ne aukštesnės negu antros eilės narius.
- Apskaičiuojamas aproksimuojančiosios kvadratinės funkcijos minimumo taškas x_{i+1} ir juo pakeičiamas x_i.
- Metodas apibrėžtas naudojant pirmąsias ir antrąsias išvestines, bet nenaudojant tikslo funkcijos reikšmių.
- Jei tikslo funkcija būtų kvadratinė, jos minimumas būtų gautas vienu žingsniu.
- Bendru atveju formulė taikoma iteratyviai.

Niutono metodo iliustracija



Niutono metodo interpretacijos iliustracija