Лекции по дисциплине "Методы оптимизации"

1 Лекция #1

1.1 Методы одномерного поиска

Рассмотрим задачу одномерной оптимизации

$$\underset{x\in[a,b]}{min}\{z = f(x)\}$$

Функцию $f(x)$ называют унимодальной функцией на отрезке $[a, b]$, если существует такая точка $x_* \in [a, b]$, что функция $f(x)$ в полуинтервале $[a, x_*)$ убывает, а в полуинтервале $(x_*, b]$ возрастает.

Пусть функция $f(x)$ унимодальна на отрезке $[a, b]$. Необходимо найти точку минимума функции на этом отрезке с заданной точностью ε. Все методы одномерного поиска базируются на последовательном уменьшении интервала, содержащего точку минимума.

Возьмем внутри отрезка $[a_0, b_0]$ две точки x_1 и x_2: $a_0 < x_1 < x_2 < b_0$,и вычислим значения функции в этих точках. Из свойства унимодальности функции можно сделать вывод о том, что минимум расположен либо на отрезке $[a_0, x_2]$, либо на отрезке $[x_1, b_0]$. Действительно, если $f(x_1) < f(x_2)$, то минимум не может находиться на отрезке $[x_2, b_0]$, а если $f(x_1) > f(x_2)$, то минимум не может находиться на отрезке $[a_0, x_2]$. Если же $f(x_1) = f(x_2)$, то минимум находится на интервале $[x_1, x_2]$.

Алгоритм заканчивается, когда длина интервала, содержащего минимум, становится меньше ε. Различные методы одномерного поиска отличаются выбором точек $x_1, \quad x_2$. Об эффективности алгоритмов можно судить по числу вычислений функции, необходимому для достижения заданной точности.

1.1.1 Метод дихотомии

Точки x_1, x_2 выбираются на расстоянии $\delta < \varepsilon/2$ от середины отрезка:

$$x_1 = (a_i + b_i)/2 - \delta, \tag{1}$$
$$x_2 = (a_i + b_i)/2 + \delta \tag{2}$$

За одну интерацию интервал неопределенности уменьшается примерно в 2 раза. Значит, за n итераций длина интервала будт примерно равна $(b_0 - a_0)/2^n$. Для достижения точности ε потребуется приблизительно $ln((b_0 - a_0)/\varepsilon)/ln2$ итераций. На каждой итерации функция вычисляется два раза.

1.1.2 Метод золотого сечения

Точки x_1, x_2 находятся симметрично относительно середины отрезка $[a_0, b_0]$ и делят его в пропорции золотого сечения, когда длина всего отрезка относится к длине большей его части также, как длина большей части относится к длине меньшей части:

$$\frac{b_0 - a_0}{b_0 - x_1} = \frac{b_0 - x_1}{x_1 - a_0}$$

Отсюда

$$x_1 = a_i + \frac{1 - \sqrt{5}}{2}(b_i - a_i) = a_i + 0.381966011 \cdot (b_i - a_i) \quad (3)$$

Аналогично для второй точки.

За одну итерацию интервал неопределенности уменьшается в $\frac{\sqrt{5}+1}{2} = 1.618..$ раз, однако на следующей итерации мы будем вычислять функцию только один раз, так как по свойству золотого сечения $\frac{x_2 - x_1}{b - x_1} = 0.381..$ и $\frac{b - x_2}{b - x_1} = 0.618...$ Для достижения точности ε потребуется $n \geq \frac{ln((b_0 - a_0)/\varepsilon)}{ln(\frac{\sqrt{5}-1}{2})}$.

1.1.3 Метод Фибоначчи

Это улучшение реализации поиска с помощью золотого сечения, служащего для нахождения минимума/максимума функции. Подобно методу золотого сечения, он требует двух вычислений функции на первой итерации, а на каждой последующей только по одному. Однако этот метод отличается от метода золотого сечения тем, что коэффициент сокращения интервала неопределенности меняется от итерации к итерации.

Предположим, нам нужно определить минимум как можно точнее, т.е. с наименьшим интервалом неопределенности, но при этом можно произвести только n вычислений функции.

Пусть у нас есть интервал неопределенности (x_1, x_3), и нам известно значение функции $f(x_2)$, $x_2 \in (x_1, x_3)$.

Если можно вычислить функцию всего один раз в точке x_4, то где следует ее поместить, чтобы получить минимально возможный интервал неопределенности? Заранее нам не известно, как ведет себя функция, и реализуется одна из двух ситуаций:

1. $x_4 \in (x_1, x_2)$
2. $x_4 \in (x_2, x_3)$

Т.е. неизвестно, какая из ситуаций будет иметь место, выберем x_4 таким образом, чтобы минимизировать максимальную из длин

$$min\{max\{(x_3 - x_4), (x_2 - x_1)\}\}.$$

Достигнуть этого можно, сделав эти длины равными, т.е.

$$(x_3 - x_4) = (x_2 - x_1).$$

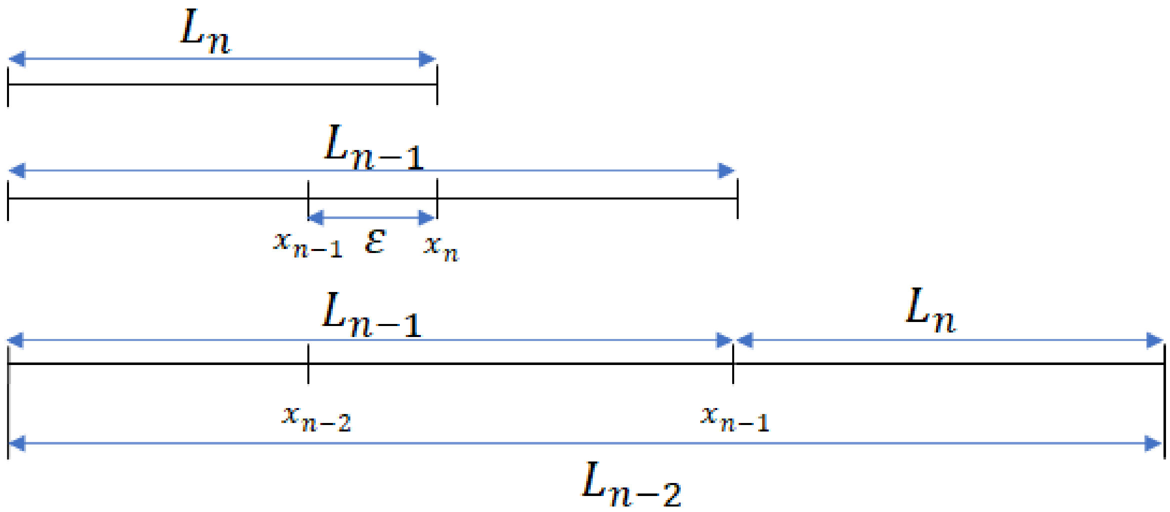
Для этого нужно поместить x_4 внутрь интервала (x_1, x_2) симметрично относительно точки x_2.

Если окажется, что можно выполнить еще одно вычисление функции, то следует применить описанную процедуру к новому интервалу непопределенности.

Стратегия ясна: нужно поместить следующую точку внутрь интервала, симметрично относительно уже находящейся там точки.

Остался один вопрос: как начать вычисления? Для ответа на этот вопрос, начнем с конца.

На n-ом вычислении n-ю точку стоит поместить симметрично по отношению к $(n-1)$-й точке. Чтобы получить наибольшее уменьшение интервала на данном этапе, следует разделить пополам предыдущий интервал.



Обозначим за ε минимальную длину интервала неопределенности. Тогда

$$\begin{gathered}
L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon \\
L_{n-2} = L_{n-1} + L_n \\
L_{n-3} = L_{n-2} + L_{n-1} \\
\dots \\
L_{j-3} = L_j + L_{j+1}, \quad 1 < j < n
\end{gathered}$$

Преобразуем полученную систему:

$$\begin{gathered}
L_{n-1} = 2L_n - \varepsilon \\
L_{n-2} = 3L_n - \varepsilon \\
L_{n-3} = 5L_n - 2\varepsilon \\
L_{n-4} = 8L_n - 3\varepsilon
\end{gathered}$$

Числа Фибоначчи определяются соотношениеми:

$$F_0 = F_1 = 1, \quad F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \quad n = 2, 3, \dots$$

n-е число Фибоначчи представимо в виде:

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{5}}[(\frac{1+\sqrt{5}}{2})^n - (\frac{1-\sqrt{5}}{2})^n], n = 1, 2, .. \tag{4}$$

На начальном интервале вычисляются точки

$$x_1 = a_0 + \frac{F_n}{F_{n+2}}(b_0 - a_0), \tag{5}$$

$$x_2 = a_0 + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0) \tag{6}$$

где n выбирается исходя из точности и начальной длины интервала.

На k-м шаге метода будет получена тройка чисел a_k, b_k, x_k, локализирущая минимум $f(x)$, такая что

$$\Delta_k = b_k - a_k = (b_0 - a_0)\frac{F_{n-k+3}}{F_{n+2}}, \quad 1 \leq k \leq n, \quad a_1 = a_0, b_1 = b_0,$$

а точка $x_k, a_k < x_k < b_k$, с вычисленным значением

$$f(x_k) = \underset{1 \geq i \geq k}{min} f(x_i)$$

совпадает с одной из точек

$$x_1 = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+1}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0),$$
$$x_2 = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n-k+3}}(b_k - a_k) = a_k + \frac{F_{n-k+2}}{F_{n+2}}(b_0 - a_0)$$

расположенных на отрезке $[a_k, b_k]$ симметрично относительно его середины. При $k = n$ процесс заканчивается. В этом случае длина отрезка

$$\Delta_n = b_n - a_n = (b_0 - a_0)/F_{n+2},$$

а точки

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

совпадат и делят отрезок пополам.

Следовательно

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

Отсюда можно выбрать n из условия

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

1.1.4 Поиск минимума на прямой

В рассмотренных ранее методах требуется знать начальный отрезок, содержащий точку минимума. Поиск на прямой заключается в том, что осуществляются возрастающие по величине шаги до тех пор, пока не будет пройдена точка минимума функции (т.е. убывание функции сменится на возрастане). На первом шаге выбираем начальную точку x_0 и определяем направление убывания функции.