

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ

Лекция 1

Константин Ловецкий
lovetskiy@gmail.com

Сентябрь 2012

Постановка задачи оптимизации

Условия оптимальности.

Условная и безусловная оптимизация.

Одномерный случай.

Примеры алгоритмов и процедур

Постановка задачи оптимизации

Постановка задачи оптимизации начинается с **определения** набора **независимых переменных** и обычно включает **условия**, которые характеризуют их **приемлемые значения**. Эти условия называют **ограничениями** задачи. Еще одной обязательной компонентой описания является **скалярная мера «качества»**, именуемая **целевой функцией** и зависящая каким-то образом от переменных.

Решение оптимизационной задачи — это приемлемый набор значений переменных, которому отвечает оптимальное значение целевой функции. Под оптимальностью обычно понимают **максимальность** или **минимальность**; например, речь может идти о максимизации прибыли или минимизации массы.

Постановка задачи оптимизации

Задачей оптимизации называется задача поиска минимума скалярной функции на множестве значений ее аргумента, удовлетворяющих некоторым ограничениям.

В основном речь пойдет об ограничениях, которые выражаются в терминах соотношений на значения непрерывных функций от переменных задачи; другие типы ограничений будут рассмотрены позже.

Постановка задачи оптимизации

К задачам на поиск оптимума сводятся многие из проблем математики, системного анализа, техники, экономики, медицины и статистики. В частности, они возникают при построении математических моделей.

Когда для изучения какого-нибудь сложного явления конструируется математическая модель, к оптимизации прибегают для того, чтобы определить такую структуру и такие параметры последней, которые обеспечивали бы наилучшее согласование с реальностью.

Постановка задачи оптимизации

Курс посвящен вопросам численного поиска оптимума и оптимизационным алгоритмам. При описании оптимизационных алгоритмов часто используют стандартные формы представления задач. В качестве такой формы мы будем использовать следующую:

$$\text{Найти} \quad \min_{x \in R^n} F(x)$$

при ограничениях

$$c_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m';$$

$$c_i(x) \geq 0, \quad i = m' + 1, \dots, m;$$

Классификация оптимизационных задач

Подавляющее большинство оптимизационных задач, возникающих на практике, приводятся к стандартному виду. Даже те задачи, которые сами по себе в эти рамки не укладываются, часто могут быть сведены к последовательности стандартных. Однако существование столь универсальной формы представления вовсе не означает, что различиями между отдельными задачами следует пренебрегать.

Наоборот, имея дело с конкретной постановкой, всегда надо постараться использовать ее особенности для того, чтобы организовать поиск решения самым эффективным образом. К примеру, усилия можно сэкономить, отказавшись от каких-то проверок, необходимых в общем случае, но лишних в конкретном, или избежав повторных вычислений величин, являющихся константами.

Рассмотрим классификацию разнообразных задач по тем их особенностям, которые наиболее существенны для выбора алгоритма решения.

Постановка задачи оптимизации

Вначале обсудим весьма широкий класс задач, именуемых нелинейными непрерывными задачами условной оптимизации (НСР).

Ставятся они следующим образом:

Задача НСР. Найти $\min_{x \in R^n} F(x)$
при ограничениях $c_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m';$
 $c_i(x) \geq 0, \quad i = m' + 1, \dots, m;$

Произвольную точку x , удовлетворяющую всем ограничениям НСР, будем называть допустимой. Множества всех допустимых точек называют допустимой областью.

Классификация оптимизационных задач

Класс задач НСР разбивают на подклассы, и делается это по ряду признаков, существенных для выбора алгоритма и метода решения.

Типы функций	Типы ограничений
Функция одной переменной	Ограничения отсутствуют
Линейная функция	Простые ограничения на переменные
Сумма квадратов линейных функций	Линейные функции
Квадратичная форма	Линейные функции с разреженной матрицей коэффициентов
Сумма квадратов нелинейных функций	Гладкие нелинейные функции
Гладкая нелинейная функция	Гладкие нелинейные функции с разреженной матрицей Якоби
Нелинейная функция с разреженной матрицей Гессе	Негладкие нелинейные функции
Негладкая нелинейная функция	

Классификация оптимизационных задач

Определим, что понимается под «решением» задачи НСР, и выясним, какими свойствами оно обладает.

Мы будем называть решением НСР точку локального минимума целевой функции в допустимой области, т. е. точку, удовлетворяющую ограничениям задачи и отличающуюся тем, что между значениями целевой функции в ней и в соседних допустимых точках имеются специфические отношения.

Формальные определения звучат следующим образом.

Классификация оптимизационных задач

Пусть x^* — допустимая точка **НСР** и через $N(x^*, \delta)$ обозначено множество допустимых точек, содержащихся в δ -окрестности x^* .

Определение А. Точка x^* является точкой **сильного** локального минимума в задаче **НСР**, если существует число $\delta > 0$, такое, что

$$\text{А1. } F(x^*) < F(y) \quad \text{для всех } y \in N(x^*, \delta), y \neq x^* .$$

Заметим, что под это определение подпадает, в частности, особый случай, когда $N(x^*, \delta)$ состоит из единственной точки x^* .

Определение В. Точка x^* является точкой **слабого** локального минимума в задаче **НСР**, если существует число $\delta > 0$, такое, что

$$\text{В1. } F(x^*) \leq F(y) \quad \text{для всех } y \in N(x^*, \delta) ;$$

В2. x^* не удовлетворяет определению сильного локального минимума.

Классификация оптимизационных задач

В соответствии с данными определениями x^* не будет точкой локального минимума, если в любой ее окрестности найдется допустимая точка с меньшим значением F .

Определение решения задачи НСР как точки локального минимума на первый взгляд может показаться довольно искусственным — ведь ясно, что наибольший интерес, как правило, представляет

глобальный минимум, т. е. точка, в которой значение целевой функции не хуже, чем в любой допустимой, а не только в близлежащих.

Однако если мы хотим называть рассматриваемые в дальнейшем процедуры методами решения задач НСР, то решение надо определять именно так, поскольку все они являются методами локальной минимизации. Конечно, с их помощью можно искать и точки глобальных минимумов, но, за исключением ряда специальных случаев, когда локальное решение автоматически оказывается глобальным, успеха здесь гарантировать нельзя. Что же касается **других методов**, которые надежно сходились бы к точкам **глобальных** минимумов в мало-мальски интересных многоэкстремальных задачах, то их **просто не существует**.

Последнее, впрочем, не должно удручать практиков, поскольку для большинства прикладных задач удовлетворительные решения все-таки находятся.

БЕЗУСЛОВНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

Мы начнем изучение условий оптимальности с простейшей задачи о безусловной минимизации функции одной переменной:

найти $\min_{x \in \mathbb{R}} F(x)$

Если $F(x)$ всюду дважды непрерывно дифференцируема и x^* — точка ее локального минимума, то должны выполняться следующие соотношения:

Необходимые условия минимума в одномерной задаче без ограничений

A1. $f'(x^*)=0.$

A2. $f''(x^*) \geq 0.$

БЕЗУСЛОВНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ

Требование равенства нулю производной $f'(x^*)$ называют необходимым условием оптимальности **первого** порядка. Это условие касается только первой производной.

Неравенство $f''(x^*) \geq 0$ принято называть условием **второго** порядка.

Достаточные условия минимума в одномерной задаче без ограничений

V1. $f'(x^*) = 0.$

V2. $f''(x^*) > 0.$

Функции одной переменной

- **Метод золотого сечения.** Пусть задана функция

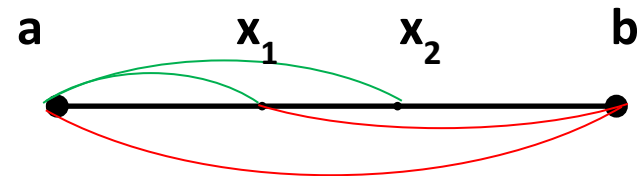
$$f(x) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}, f(x) \in C([a, b])$$

- Тогда для того, чтобы найти определённое значение этой функции на заданном отрезке, отвечающее критерию поиска (минимум), рассматриваемый отрезок делится в пропорции золотого сечения в обоих направлениях, то есть выбираются две точки такие, что:

$$\frac{b-a}{b-x_1} = \frac{b-a}{x_2-a} = \phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.618\dots$$

Таким образом:

$$\begin{aligned}x_1 &= b - \frac{(b-a)}{\phi} \\x_2 &= a + \frac{(b-a)}{\phi}\end{aligned}$$



Формализация метода золотого сечения

1. **Шаг 1.** Задаются начальные границы отрезка a , b и точность ε , рассчитывают начальные точки деления:

$$x_1 = b - \frac{(b-a)}{\phi}, \quad x_2 = a + \frac{(b-a)}{\phi} \text{ и значения в них целевой функции: } y_1 = f(x_1), \quad y_2 = f(x_2).$$

2. **Шаг 2.**

- Если $y_1 \leq y_2$, то $b = x_2$, $x_2 = x_1$, $x_1 = b - \frac{(b-a)}{\phi}$, $y_2 = y_1$, $y_1 = f(x_1)$.
- Иначе $a = x_1$, $x_1 = x_2$, $x_2 = a + \frac{(b-a)}{\phi}$, $y_1 = y_2$, $y_2 = f(x_2)$.

3. **Шаг 3.**

- Если $|b-a| < \varepsilon$, то $x = \arg \min(y_1, y_2)$ и останов.
- Иначе возврат к шагу 2.

Троичный поиск

Троичный поиск (*Тернарный поиск*) — это метод в информатике для поиска максимумов и минимумов функции, которая либо сначала строго возрастает, затем строго убывает, либо наоборот. Троичный поиск определяет, что минимум или максимум не может лежать либо в первой, либо в последней трети области, и затем повторяет поиск на оставшихся двух третях.

Троичный поиск демонстрирует парадигму программирования «разделяй и властвуй».

Предположим, что мы ищем максимум функции $f(x)$, и что нам известно, что максимум лежит между A и B . Чтобы алгоритм был применим, должно существовать некоторое значение x , такое что

- для всех a, b , для которых $A \leq a < b \leq x$, выполняется $f(a) < f(b)$, и
- для всех a, b , для которых $x \leq a < b \leq B$, выполняется $f(a) > f(b)$.

Троичный поиск

Алгоритм: обращение к рекурсивной функции

```
function ternarySearch(f, left, right, absolutePrecision)
```

```
//left and right are the current bounds; the maximum is between them
```

```
if (right-left < absolutePrecision)
```

```
    return (left+right)/2
```

```
leftThird := (left*2+right)/3
```

```
rightThird := (left+right*2)/3
```

```
if (f(leftThird) < f(rightThird))
```

```
    return ternarySearch(f, leftThird, right, absolutePrecision)
```

```
else
```

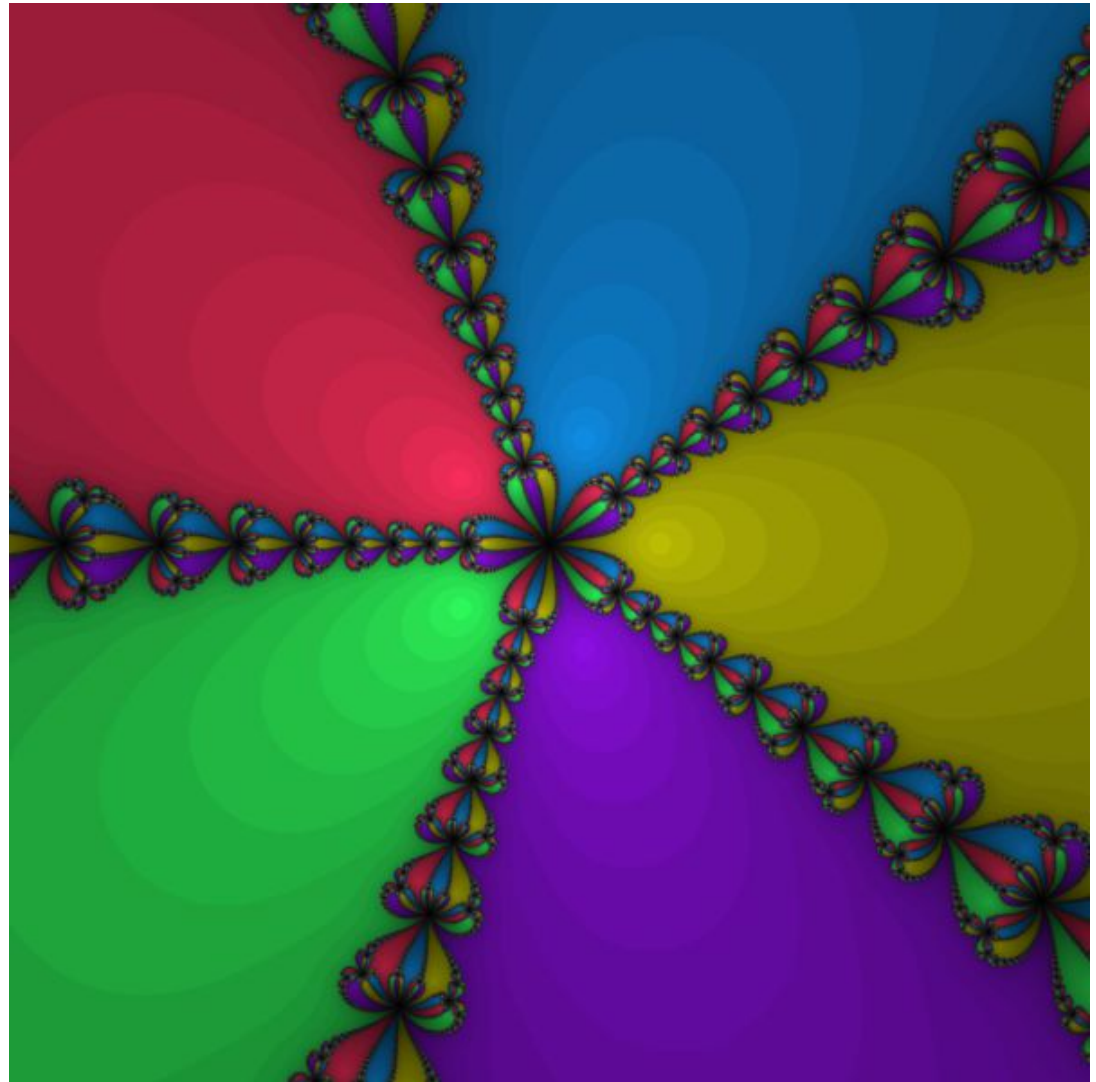
```
    return ternarySearch(f, left, rightThird, absolutePrecision)
```

```
end
```

Бассейны Ньютона

$$p(x) = x^5 - 1$$

Бассейны Ньютона для полинома пятой степени. Разными цветами покрашены области притяжения для разных корней. Более тёмные области соответствуют большему числу итераций



Метод Ньютона

Обобщение на комплексную плоскость

Метод Ньютона поиска минимума может быть применён и для нахождения нуля функции комплексного переменного. При этом процедура остаётся неизменной:

$$z_{n+1} = z_n - \frac{f'(z_n)}{f''(z_n)}$$

Особый интерес представляет выбор начального приближения. Ввиду того, что функция может иметь несколько нулей, в различных случаях метод может сходиться к различным значениям, и вполне естественно возникает желание выяснить, какие области обеспечат сходимость к тому или иному корню. Этот вопрос заинтересовал *Артура Кейли* ещё в 1879 году, однако разрешить его смогли лишь в 70-х годах *двадцатого столетия* с появлением вычислительной техники. Оказалось, что на пересечениях этих областей (их принято называть *областями притяжения*) образуются так называемые *фракталы* — бесконечные самоподобные геометрические фигуры.

Ввиду того, что Ньютон применял свой метод исключительно к *полиномам*, фракталы, образованные в результате такого применения, обрели название *фракталов Ньютона* или *бассейнов Ньютона*.

Метод Ньютона

http://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method

http://en.wikipedia.org/wiki/File:NewtonIteration_Ani.gif

Интернет – наше ВСЕ!

Опыт – это то, что ты получаешь только тогда, когда в нем нуждаешься ...

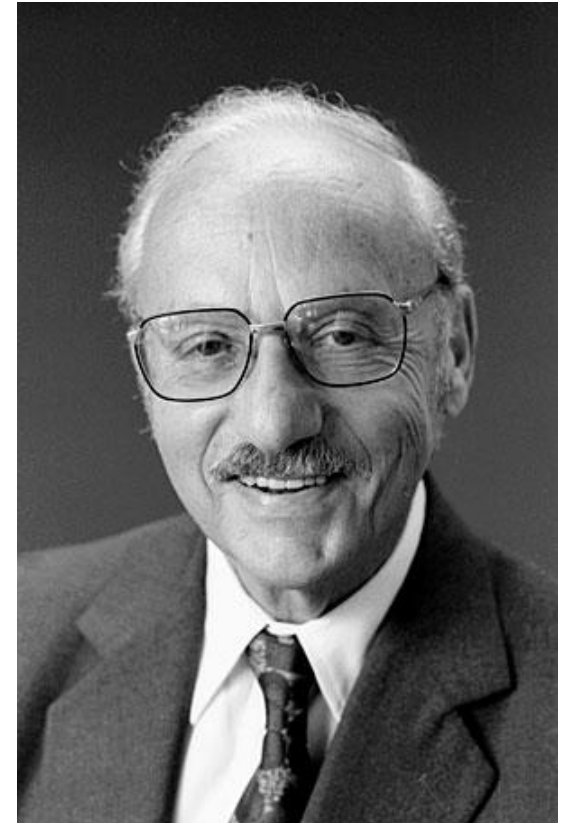
Справочник по проблемам оптимизации
Decision Tree for Optimization Software

<http://plato.asu.edu/guide.html>

История



В 1820 г. Ж. Фурье и затем в 1947 г. Дж. Данциг предложил метод направленного перебора смежных вершин в направлении возрастания целевой функции — симплекс-метод, ставший основным при решении задач линейного программирования.



Жан Батист Жозеф Фурье (фр. Jean Baptiste Joseph Fourier; 21 марта 1768, Осер, Франция — 16 мая 1830, Париж), французский математик и физик.

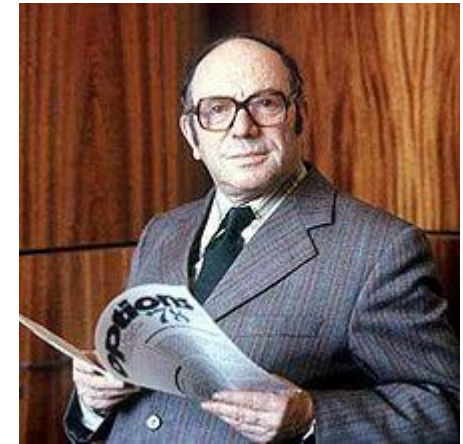
George Bernard Dantzig (November 8, 1914 – May 13, 2005) was an American mathematician, and the Professor Emeritus of Transportation Sciences and Professor of Operations Research and of Computer Science at Stanford.

История

Выделение класса экстремальных задач, определяемых линейным функционалом на множестве, задаваемом линейными ограничениями, следует отнести к 30-м годам XX столетия. Одними из первых, исследовавшими в общей форме задачи линейного программирования, были: Джон фон Нейман, знаменитый математик и физик, доказавший основную теорему о матричных играх и изучивший экономическую модель, носящую его имя; советский академик, лауреат Нобелевской премии (1975 г.) Л. В. Канторович, сформулировавший ряд задач линейного программирования и предложивший (1939 г.) метод их решения (метод разрешающих множителей), незначительно отличающийся от симплекс-метода.



Леонид Витальевич Канторович (6 (19) января 1912, Санкт-Петербург — 7 апреля 1986, Москва) — советский математик и экономист, лауреат Нобелевской премии по экономике 1975 года «за вклад в теорию оптимального распределения ресурсов». Пионер и один из создателей линейного программирования.



Джон фон Нейман. Наиболее известен как праотец современной архитектуры компьютеров (так называемая архитектура фон Неймана), применением теории операторов к квантовой механике (см. Алгебра фон Неймана), а также как участник Манхэттенского проекта и как создатель теории игр и концепции клеточных автоматов.