ИНТЕРВАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА

С.П. Шарый

Институт вычислительных технологий СО РАН

г. Новосибирск

Часть I

Вводная

Интервалы

$$[1, 2], \qquad [1000, 1003], \qquad \ldots$$

Определение

Интервальный анализ —
раздел вычислительной математики, посвящённый учёту ошибок округления при проведении расчётов на цифровых ЭВМ . . .

«Математическая Энциклопедия»
(Москва: Советская Энциклопедия, 1977–85 годы)

«Математический Энциклопедический Словарь»
(Москва: Советская Энциклопедия, 1988)

Интервалы как средство работы с неопределённостями и неоднозначностями

«Неопределённость» — состояние частичного знания о рассматриваемой величине

Модели неопределённости

- вероятностная (стохастическая)
- интервальная (ограниченная по величине)
- нечёткая (размытая)

Интервальное описание неопределённости — наиболее «скупое», но математический аппарат для его обработки наиболее развит.

Более современное определение

Интервальный анализ — это математическая дисциплина,

- *предметом которой является решение задач с интервальными (ограниченными) неопределённостями и неоднозначностями в данных, возникающими в постановке задачи либо в процессе решения,*

- *метод которой характеризуется рассмотрением множеств неопределённости как самостоятельных целостных объектов, установлением между ними операций, отношений и т.п.*

Интернет-портал
«Интервальный анализ и его приложения»

http://www.nsc.ru/interval

Задачи глобального поиска

1) Задача глобальной оптимизации.

2) Задача глобального решения уравнений и систем уравнений.

3) . . .

Задача глобальной оптимизации

— найти глобальный минимум функции $F : \mathbb{R}^n \supset \boldsymbol{X} \rightarrow \mathbb{R}$ на прямоугольном брусе $\boldsymbol{X}$ со сторонами, параллельными координатным осям:

$$\boxed{\text{найти} \quad \min_{x \in \boldsymbol{X}} F(x)}$$

глобальный $=$ наилучший во всей области $\boldsymbol{X}$

Задача глобального решения уравнений и систем уравнений

Найти все решения системы уравнений

$$\begin{cases} F_1(\,x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ F_2(\,x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ \vdots & \ddots \quad \vdots & \vdots \\ F_n(\,x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \end{cases}$$

или, кратко,

$$F(x) \;=\; 0,$$

где $F(x) = \Bigl(F_1(x), F_2(x), \ldots, F_n(x)\Bigr)^{\top}$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^{\top}$.

Часть II

Основы интервальной техники

Интервалы

Интервалы

$$[1, 2], \qquad [1000, 1003], \qquad \ldots$$

Интервалы

$$[1, 2], \qquad [1000, 1003], \qquad \ldots$$

$$\Big(\,[1, 2],\;\; [1000, 1003]\,\Big)$$

$$\begin{pmatrix} [1, 2] \\ [1000, 1003] \end{pmatrix}$$

Интервалы

$$[1,2], \qquad [1000,1003], \qquad \ldots$$

$$\big(\,[1,2],\ [1000,1003]\,\big)$$

$$\begin{pmatrix} [1,2] \\ [1000,1003] \end{pmatrix}$$

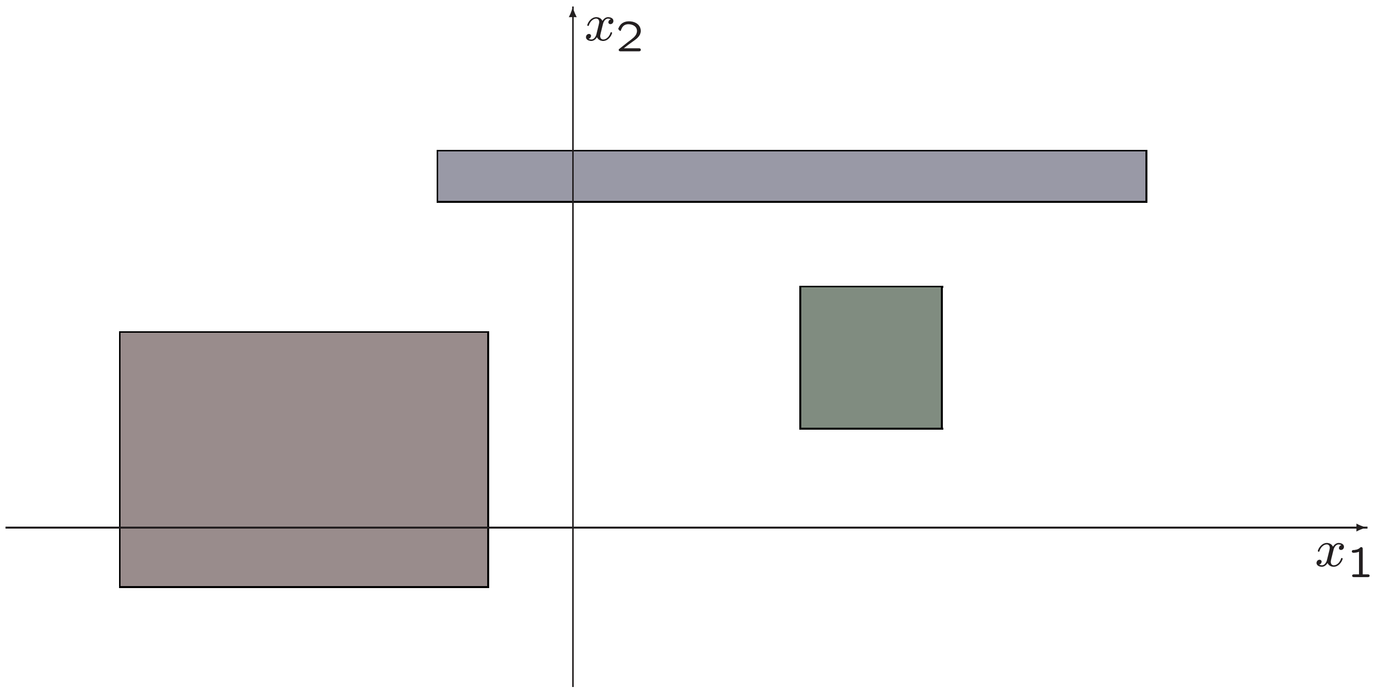
интервальные векторы —
это прямые произведения
одномерных интервалов

Интервалы

$$[1,2], \qquad [1000,1003], \qquad \ldots$$

$$\big(\,[1,2],\ [1000,1003]\,\big)$$

$$\begin{pmatrix} [1,2] \\ [1000,1003] \end{pmatrix}$$



Характеристики интервалов

$$\underline{\boldsymbol{x}}, \qquad \overline{\boldsymbol{x}}$$ — нижний и верхний концы

$$\operatorname{mid} \boldsymbol{x} = \tfrac{1}{2}(\,\overline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{x}}\,)$$ — середина

$$\operatorname{wid} \boldsymbol{x} = \overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}$$ — ширина

$$\operatorname{rad} \boldsymbol{x} = \tfrac{1}{2}(\,\overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{x}}\,)$$ — радиус

$$|\boldsymbol{x}| = \max\{\,|\underline{\boldsymbol{x}}|, |\overline{\boldsymbol{x}}|\,\}$$ — абсолютное значение (модуль)

Расстояние между интервалами

$$\operatorname{dist}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \max\Big\{\,|\underline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{y}}|,\ |\overline{\boldsymbol{x}} - \overline{\boldsymbol{y}}|\,\Big\}$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1, 2] \qquad\qquad y \in [3, 7]$$

$$x + y \in \ ?$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1,2] \qquad\qquad y \in [3,7]$$

$$x + y \in \ ?$$

$$1 \le x \le 2 \qquad\qquad 3 \le y \le 7$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1, 2] \qquad\qquad y \in [3, 7]$$

$$x + y \in [4, 9] = [1 + 3, 2 + 7]$$

Интервалы
как средство работы с областями значений

$$x \in [1,2] \qquad\qquad y \in [3,7]$$

$$x+y \in [4,9] = [1+3, 2+7]$$

Аналогично и с другими арифметическими операциями . . .

Классическая интервальная арифметика $\mathbb{IR}$

— алгебраическая система, образованная интервалами
$\boldsymbol{x} = [\underline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{x}}] \subset \mathbb{R}$ так, что

$$\boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} = \left\{ x \star y \mid x \in \boldsymbol{x}, y \in \boldsymbol{y} \right\} \qquad \text{для} \qquad \star \in \{ +, -, \cdot, / \}$$

$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \left[\underline{\boldsymbol{x}} + \underline{\boldsymbol{y}},\ \overline{\boldsymbol{x}} + \overline{\boldsymbol{y}} \right]$$

$$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} = \left[\underline{\boldsymbol{x}} - \overline{\boldsymbol{y}},\ \overline{\boldsymbol{x}} - \underline{\boldsymbol{y}} \right]$$

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} = \left[\min\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\},\ \max\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}}, \overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\} \right]$$

$$\boldsymbol{x} / \boldsymbol{y} = \boldsymbol{x} \cdot \left[1/\overline{\boldsymbol{y}},\ 1/\underline{\boldsymbol{y}} \right] \qquad \text{для} \quad \boldsymbol{y} \not\ni 0$$

Можно ли использовать

результаты такого вычисления

далее в цепочках вычислений?...

Основная теорема интервальной арифметики

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ — рациональная функция
от аргументов $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n$.

Если для некоторого бруса $\boldsymbol{x} = (\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ определён результат $\boldsymbol{f}_{\natural}(\boldsymbol{x})$ подстановки вместо аргументов функции $f(x)$ интервалов $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ и выполнения всех действий над ними по правилам интервальной арифметики, то

$$\{\, f(\,x_1, \ldots, x_n) \mid x_1 \in \boldsymbol{x}_1, \ldots, x_n \in \boldsymbol{x}_n \,\} \;\subseteq\; \boldsymbol{f}_{\natural}(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n),$$

т. е. результат интервального оценивания $\boldsymbol{f}_{\natural}(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ содержит множество значений функции $f(\,x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n)$ на $(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$.

— естественное интервальное расширение

Монотонность по включению

$$\boldsymbol{x} \subseteq \boldsymbol{x}', \quad \boldsymbol{y} \subseteq \boldsymbol{y}' \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} \ \subseteq \ \boldsymbol{x}' \star \boldsymbol{y}'$$

для любой операции $\star \in \{ +, -, \cdot, / \}$

Доказательство Основной теоремы интервальной арифметики

Для любого $x \in \boldsymbol{x}$ по построению $\boldsymbol{f}_\natural$

$$\begin{array}{ccccc} & & \downarrow & & \\ f(x) & = & \boldsymbol{f}_\natural(x) & \in & \boldsymbol{f}_\natural(\boldsymbol{x}) \\ & & & \uparrow & \end{array}$$

в силу монотонности по включению

Пример

$$f(x) = \frac{x}{x+y} \qquad \text{для } x \in [1,2],\ y \in [3,4]$$

$$\frac{[1,2]}{[1,2]+[3,4]} = \frac{[1,2]}{[4,6]} = \left[\frac{1}{6}, \frac{2}{4}\right] = [0.166\ldots, 0.5]$$

$$g(x) = \frac{1}{1+y/x} \qquad \text{для } x \in [1,2],\ y \in [3,4]$$

$$\frac{1}{1+\frac{[3,4]}{[1,2]}} = \frac{1}{1+\left[\frac{3}{2}, 4\right]} = \frac{1}{\left[\frac{5}{2}, 5\right]} = \left[\frac{1}{5}, \frac{2}{5}\right] = [0.2, 0.4]$$

Точность интервального оценивания

— существенно зависит от вида выражения,

которое задаёт функцию

Основная теорема интервальной арифметики

(продолжение)

Если рациональное выражение для $f(\,x_1, x_2, \ldots, x_n)$ содержит не более чем по одному вхождению каждой переменной в первой степени, то имеет место точное равенство

$$\{\, f(\,x_1, \ldots, x_n) \mid x_1 \in \boldsymbol{x}_1, \ldots, x_n \in \boldsymbol{x}_n \,\} \;=\; \boldsymbol{f}_{\natural}(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n),$$

т. е. результат интервального оценивания $\boldsymbol{f}_{\natural}(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$ совпадает с множеством значений функции $f(\,x_1,\, x_2,\, \ldots\,,\, x_n)$ на $(\,\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$.

Интервальные методы как средство решения задач оптимизации

С помощью интервальной техники можем оценивать области значений функций

$$\mathrm{ran}\,(f, \boldsymbol{X}) := \{\, f(x) \mid x \in \boldsymbol{X} \,\}$$

Для непрерывной функции $f : \mathbb{R}^n \supseteq \boldsymbol{X} \to \mathbb{R}^1$

$$\mathrm{ran}\,(f, \boldsymbol{X}) \;=\; \Big[\, \min_{x\in\boldsymbol{X}} f(x),\;\; \max_{x\in\boldsymbol{X}} f(x) \,\Big].$$

. . . другая переформулировка задач оптимизации

и математического программирования

Интервальное расширение функций

Определение

Интервальная функция $\boldsymbol{f} : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}^m$ называется *интервальным расширением* точечной функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, если

1) $\boldsymbol{f}(x) = f(x)$ для $x \in \mathbb{R}^n$,

2) $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ монотонна по включению,

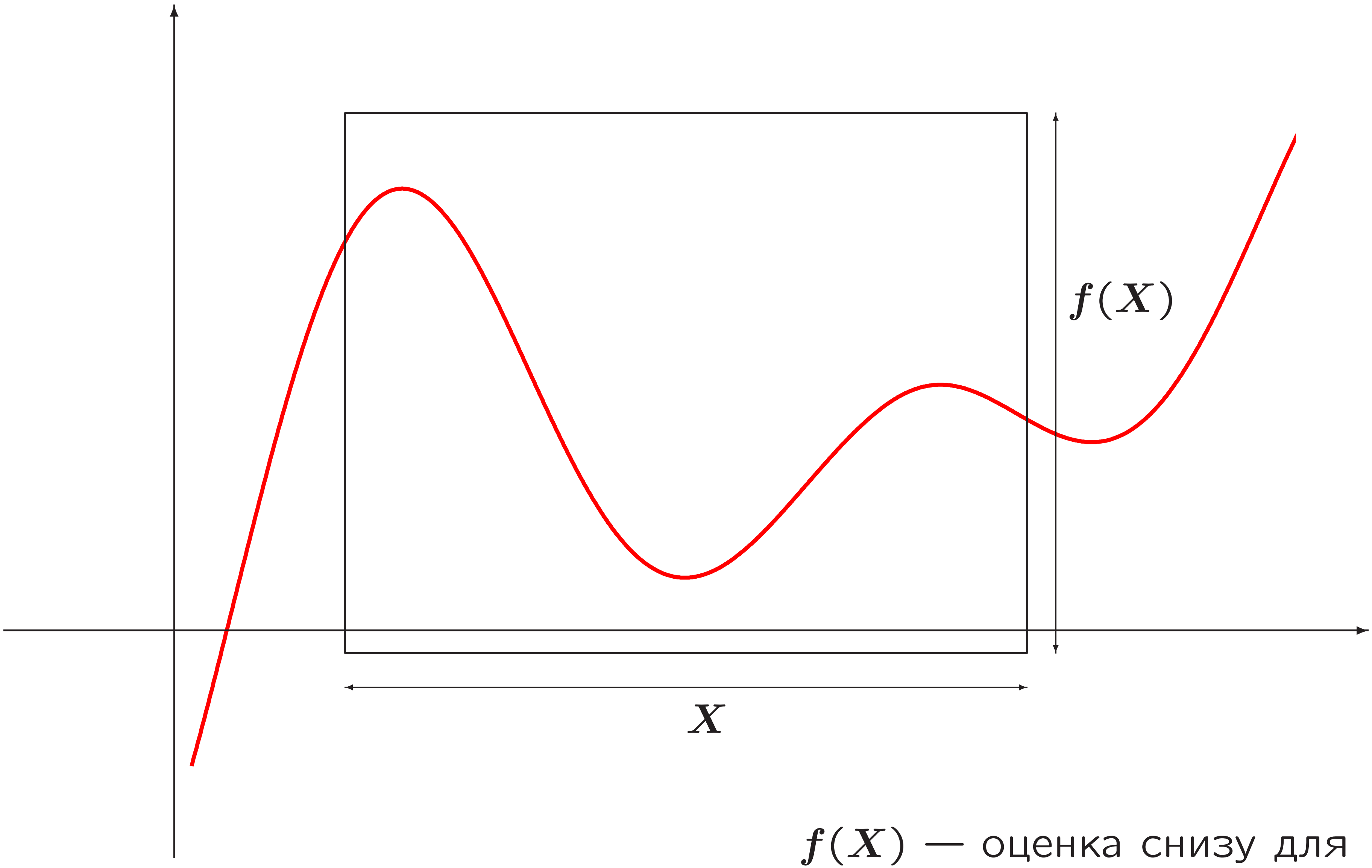
т. е. $\boldsymbol{x} \subseteq \boldsymbol{x}' \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \subseteq \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$.

$\Longrightarrow$ интервальная внешняя оценка области значений функции

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \supseteq \{\, f(x) \mid x \in \boldsymbol{x} \,\},$$

так как $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \ni \boldsymbol{f}(x) = f(x)$ для любого $x \in \boldsymbol{x}$

Интервальное расширение функции



$\underline{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})}$ — оценка снизу для $\min\limits_{x \in \boldsymbol{X}} f(x)$

Интервальные оценки для элементарных функций?

абсолютной величины (модуля), $|x|$,

степенной функции, x^{α},

показательной функции, a^{x},

логарифмической функции, $\log_a x$,

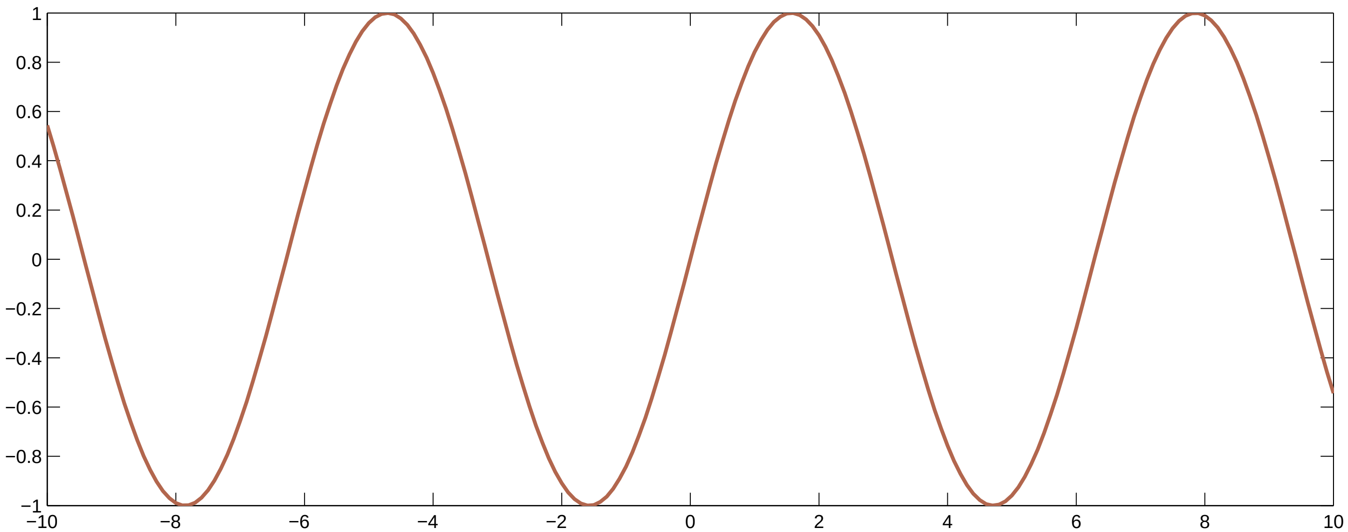
круговых тригонометрических функций, $\sin x$, $\cos x$, $\operatorname{tg} x$,

обратных тригонометрических функций, $\arcsin x$, $\arccos x$, $\operatorname{arctg} x$.

Интервальные оценки для элементарных функций

— легко вычисляются из их известных свойств,
наличия участков монотонности и т.п.

Пример: $\sin x$



Интервальные оценки элементарных функций помогают конструировать интервальные расширения сложных выражений.

Замена исходного выражения на более выгодное

— ещё одна плодотворная идея интервального оценивания

Чаще всего — линеаризация относительно некоторой точки:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \;\sim\; \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_n x_n$$

Для линейной формы естественное интервальное расширение

даёт точную область значений функции.

Центрированное интервальное расширение

$$\boldsymbol{f}_c(\boldsymbol{x}, \tilde{x}) \;=\; f(\tilde{x}) + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{x}, \tilde{x})(\,\boldsymbol{x}_i - \tilde{x}_i),$$

где

$\tilde{x} = (\,\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \ldots, \tilde{x}_n)$ — «центр», некоторая точка из $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n)$,

$\boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{x}, \tilde{x})$ — интервалы, зависящие от $\tilde{x}$ и $\boldsymbol{x}$.

$\boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{x}, \tilde{x})$ могут быть интервальными оценками $\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_i}$ на $\boldsymbol{x}$,

но возможны и другие способы их определения

Точность интервального оценивания

— критическим образом зависит также от ширины бруса оценивания

Для естественного интервального расширения

$$\operatorname{dist}\Big(\boldsymbol{f}_{\natural}(\boldsymbol{x}), \operatorname{ran}(f, \boldsymbol{x}) \Big) \;\leq\; C\,\|\operatorname{wid} \boldsymbol{x}\|$$

Для центрированной формы

$$\operatorname{dist}\Big(\boldsymbol{f}_{c}(\boldsymbol{x}, \tilde{x}), \operatorname{ran}(f, \boldsymbol{x}) \Big) \;\leq\; 2\Big(\operatorname{wid} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, \tilde{x})\Big)^{\top} \cdot |\,\boldsymbol{x} - \tilde{x}\,|$$

— как правило, второй порядок точности по $\|\operatorname{wid} \boldsymbol{x}\|$

Часть III

Глобальная оптимизация

Задача глобальной оптимизации

— найти глобальный минимум функции $F : \mathbb{R}^n \supset \boldsymbol{X} \to \mathbb{R}$
на прямоугольном брусе $\boldsymbol{X}$ со сторонами, параллельными координатным осям:

$$\boxed{\text{найти} \quad \min_{x \in \boldsymbol{X}} F(x)}$$

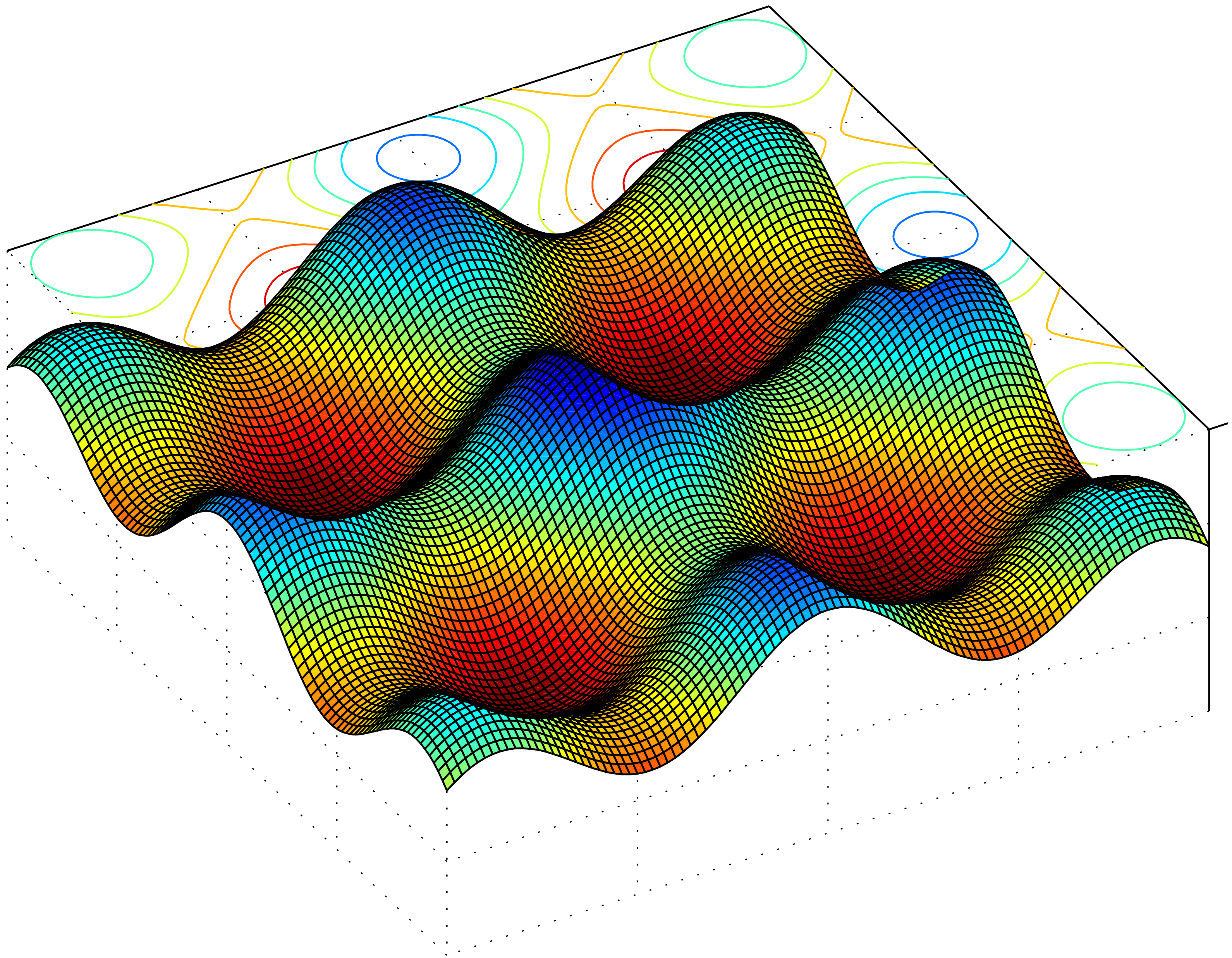
Задача глобальной оптимизации NP-трудна

= *труднорешаемая*,

т.е. для её решения требуются
не менее чем экспоненциальные
в зависимости от размера задачи
трудозатраты

Гаганов А. А.
О сложности вычисления интервала значений полинома
от многих переменных // *Кибернетика*. – 1985. – №4.
– С. 6–8.

Kreinovich V., Kearfott R.B.
Beyond convex? Global optimization is feasible only
for convex objective functions: a theorem // Journal of Global
Optimization. – 2005. – Vol. 33, No. 4. – P. 617–624.



Задача глобальной оптимизации

— найти глобальный минимум функции $F : \mathbb{R}^n \supset \boldsymbol{X} \to \mathbb{R}$ на прямоугольном брусе $\boldsymbol{X}$ со сторонами, параллельными координатным осям:

$$\boxed{\text{найти} \quad \min_{x \in \boldsymbol{X}} F(x)}$$

Если $\boldsymbol{F}$ — интервальное расширение для F, то

$\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})}$ — оценка искомого минимума снизу

Задача глобальной оптимизации

— найти глобальный минимум функции $F : \mathbb{R}^n \supset \boldsymbol{X} \to \mathbb{R}$
на прямоугольном брусе $\boldsymbol{X}$ со сторонами, параллельными координатным осям:

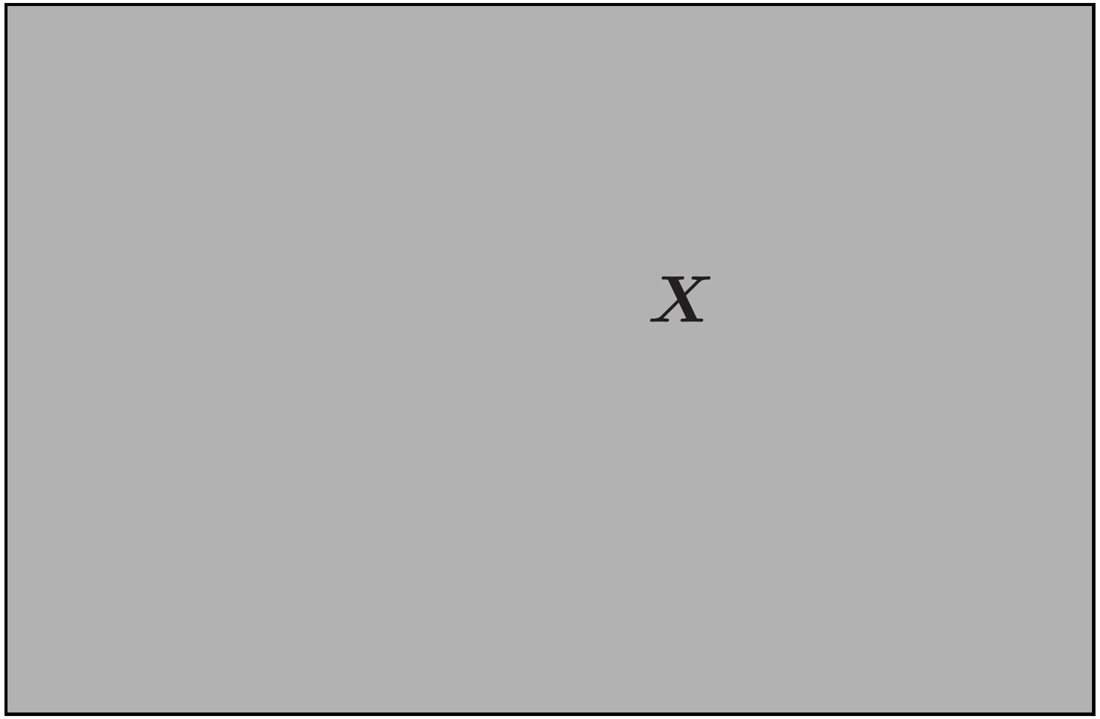
$$\boxed{\text{найти} \quad \min_{x \in \boldsymbol{X}} F(x)}$$

Если $\boldsymbol{F}$ — интервальное расширение для F, то

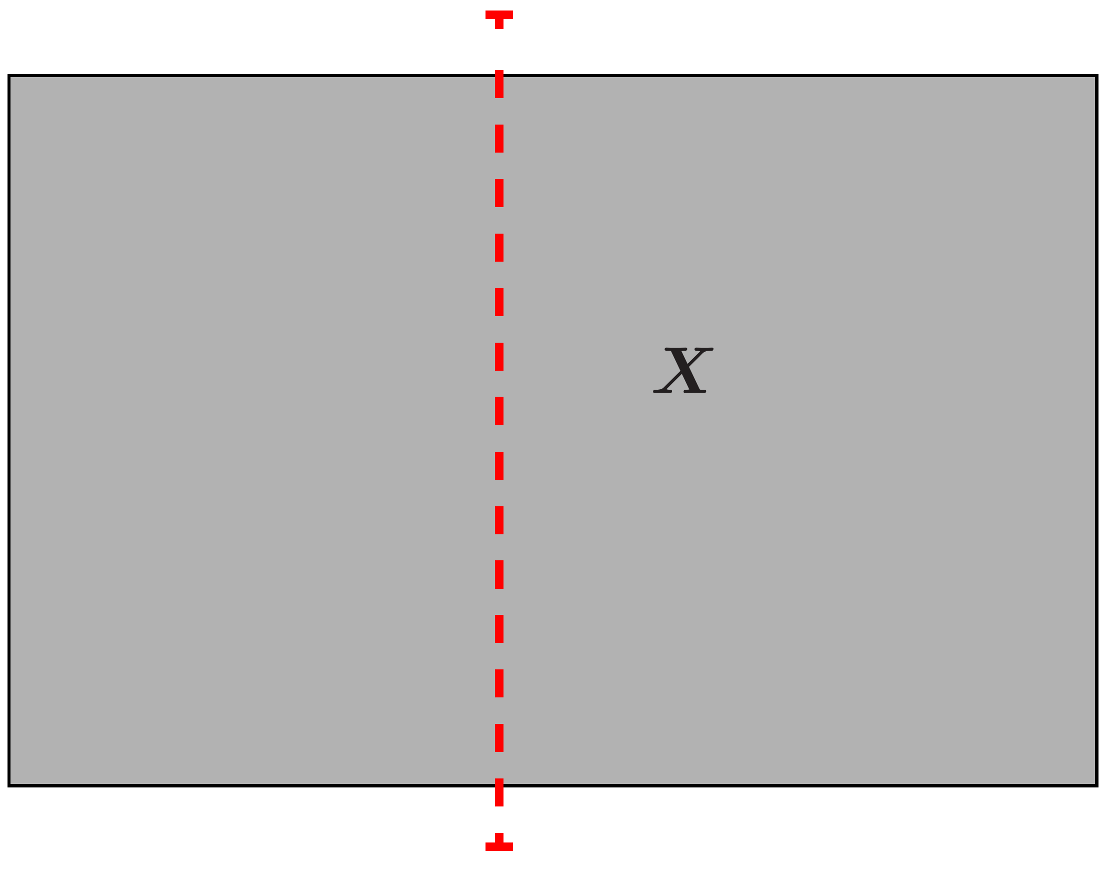
$$\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})} \text{ — оценка искомого минимума снизу}$$

Возможно, она недостаточно точна!

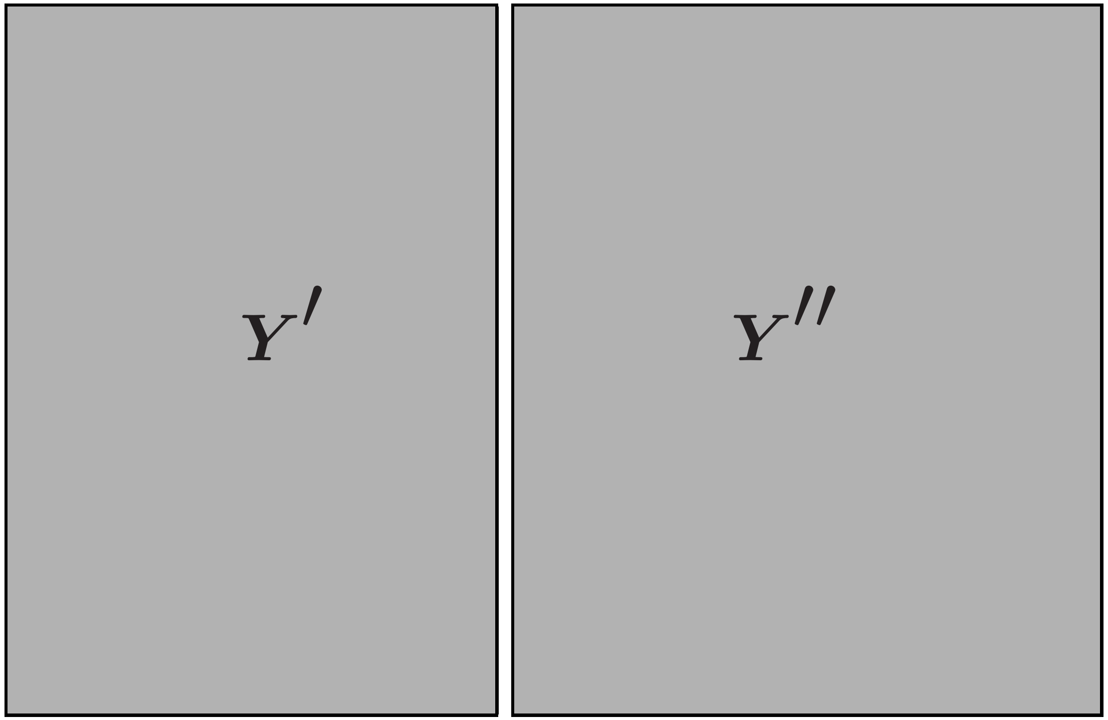
Принудительное дробление



Принудительное дробление

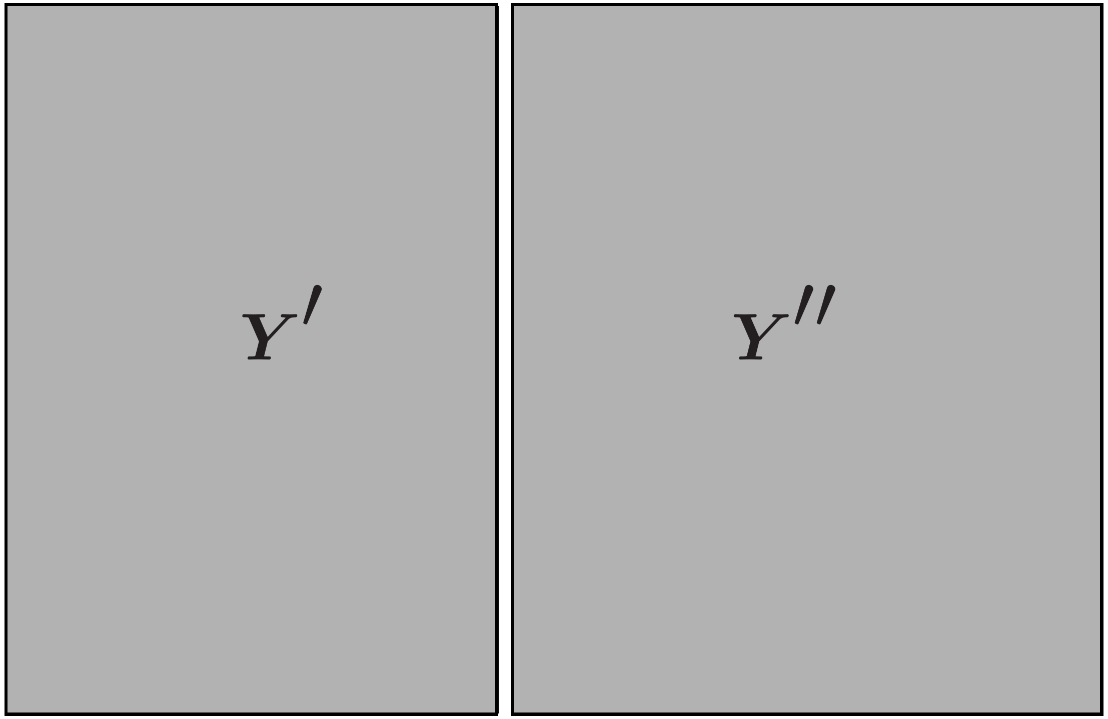


Принудительное дробление



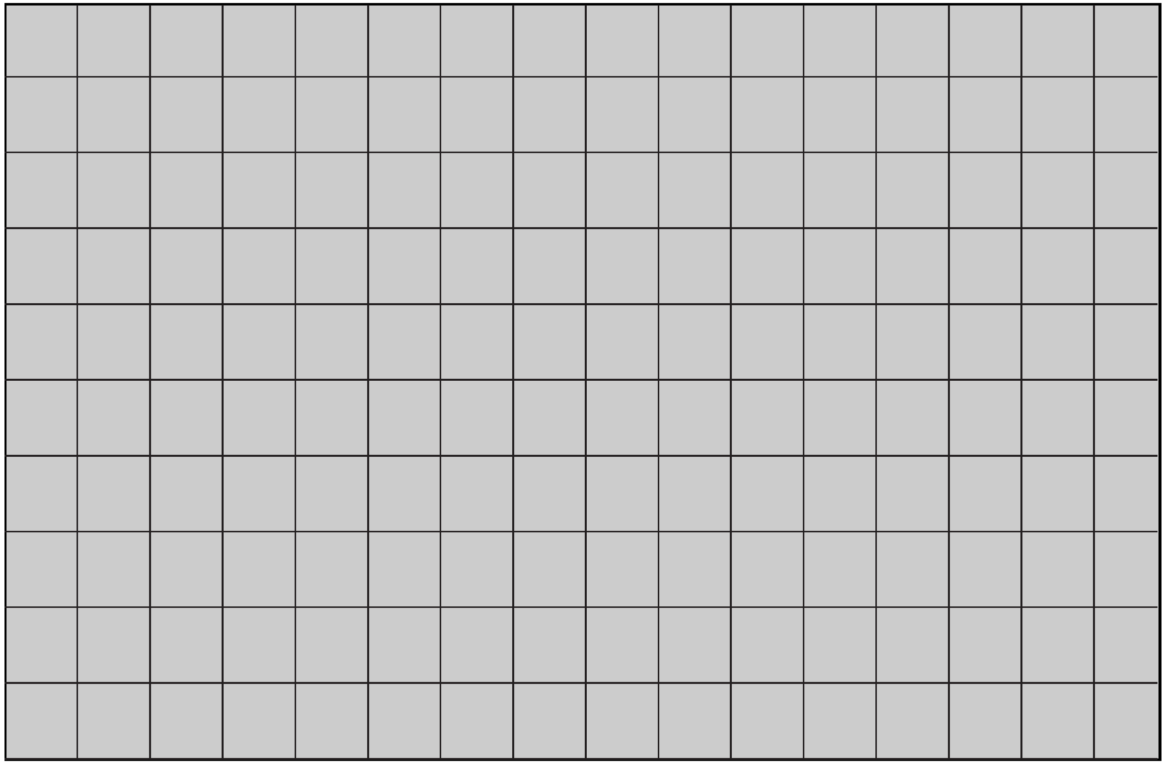
Принудительное дробление

новая и более точная оценка минимума — $\min\Bigl\{\, \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}')},\ \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}'')}\, \Bigr\}$



Принудительное дробление

Ramon E. Moore (1966) — дробим по всем компонентам одновременно



НО . . . 1) трудоёмкость растёт экспоненциально с размерностью,

2) пассивный характер алгоритма

«Метод ветвей и границ»:

S. Skelboe (1974), H. Ratschek, E. Hansen, . . .

♢ дробить будем лишь тот брус $\boldsymbol{Y}$, который обеспечивает наименьшую оценку $\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}$ для $\min_{x\in\boldsymbol{X}} F(x)$;

♢ подвергаемый дроблению брус рассекаем пополам либо на небольшое число частей;

♢ организуем список из брусов $\boldsymbol{Y}$, возникающих в процессе дробления исходного бруса $\boldsymbol{X}$, вместе с их оценками $\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}$.

Организация алгоритма

В процессе выполнения алгоритма будет поддерживаться *рабочий список* $\mathcal{L}$, состоящий из записей-пар

$$\Bigl(\, \boldsymbol{Y} \,,\; \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})} \,\Bigr),$$

где $\boldsymbol{Y}$ — интервальный n-брус, $\boldsymbol{Y} \subseteq \boldsymbol{X}$.

Записи в $\mathcal{L}$ упорядочим по возрастанию оценок $\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}$ для удобства обработки.

Первую запись списка, соответствующий брус $\boldsymbol{Y}$ и оценку $\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}$, называют *ведущими* на данном шаге.

Простейший интервальный алгоритм глобальной оптимизации функций

Вход

Интервальное расширение $\boldsymbol{F} : \mathbb{I}\boldsymbol{X} \rightarrow \mathbb{IR}$ целевой функции F.

Заданная точность $\epsilon > 0$.

Выход

Оценка снизу глобального минимума F^* функции F на $\boldsymbol{X}$.

Алгоритм

$\boldsymbol{Y} \leftarrow \boldsymbol{X}$;

вычисляем $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})$ и инициализируем список $\mathcal{L} \leftarrow \Big\{ (\boldsymbol{Y}, \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}) \Big\}$;

DO WHILE $\Big($ wid $(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})) \geq \epsilon \Big)$

рассекаем $\boldsymbol{Y}$ пополам на брусы $\boldsymbol{Y}'$ и $\boldsymbol{Y}''$;

вычисляем интервальные оценки $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}')$ и $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}'')$;

удаляем запись $(\boldsymbol{Y}, \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})})$ из списка $\mathcal{L}$;

помещаем записи $(\boldsymbol{Y}', \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}')})$ и $(\boldsymbol{Y}'', \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y}'')})$ в список $\mathcal{L}$
в порядке возрастания второго поля ;

обозначаем ведущую запись списка $\mathcal{L}$ через $(\boldsymbol{Y}, \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})})$;

END DO

$F^* \leftarrow \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})}$;

Дробление ведущих брусов

— необходимо организовать его так,

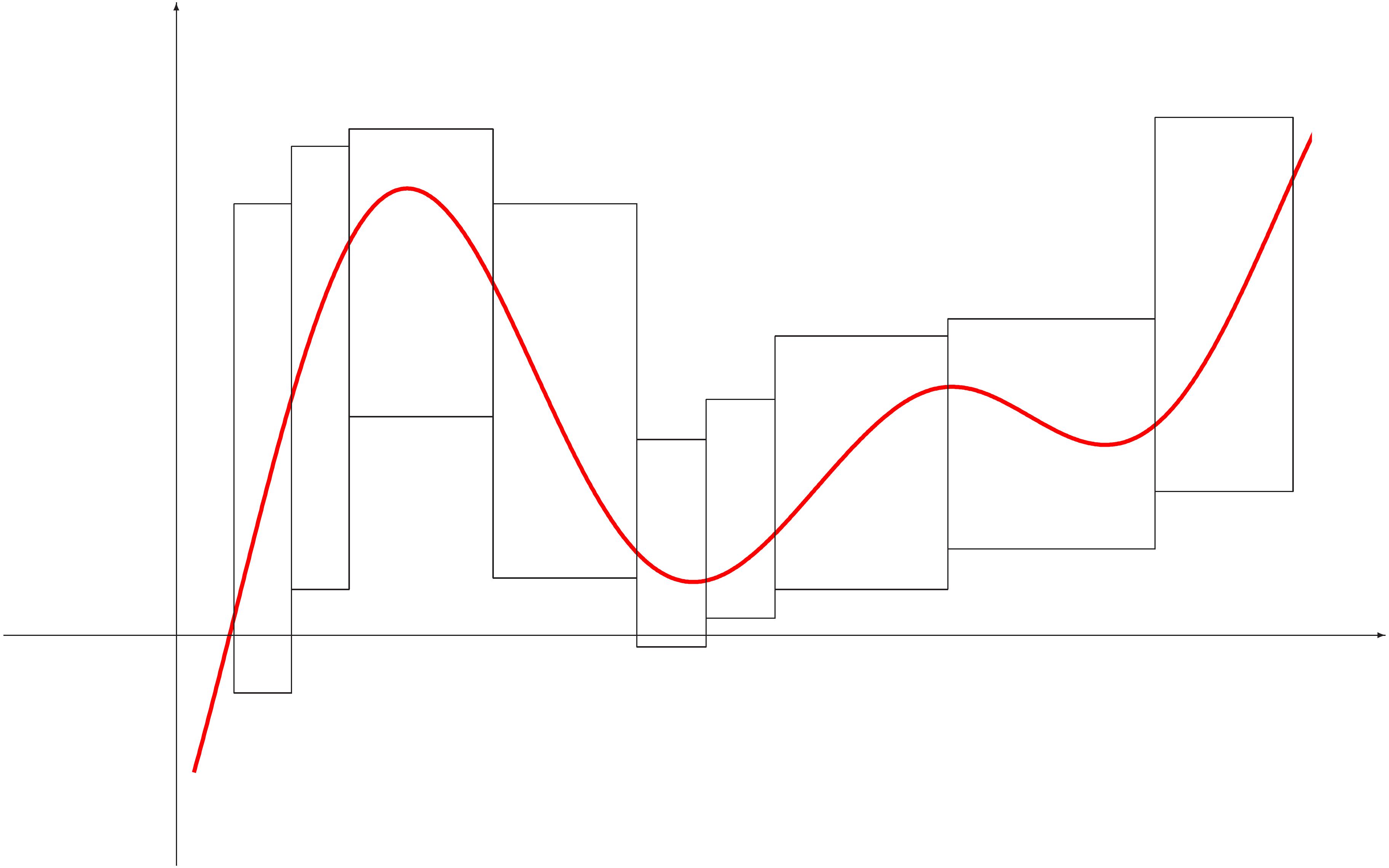
чтобы диаметр ведущих брусов стремился к нулю.

Наиболее популярный способ

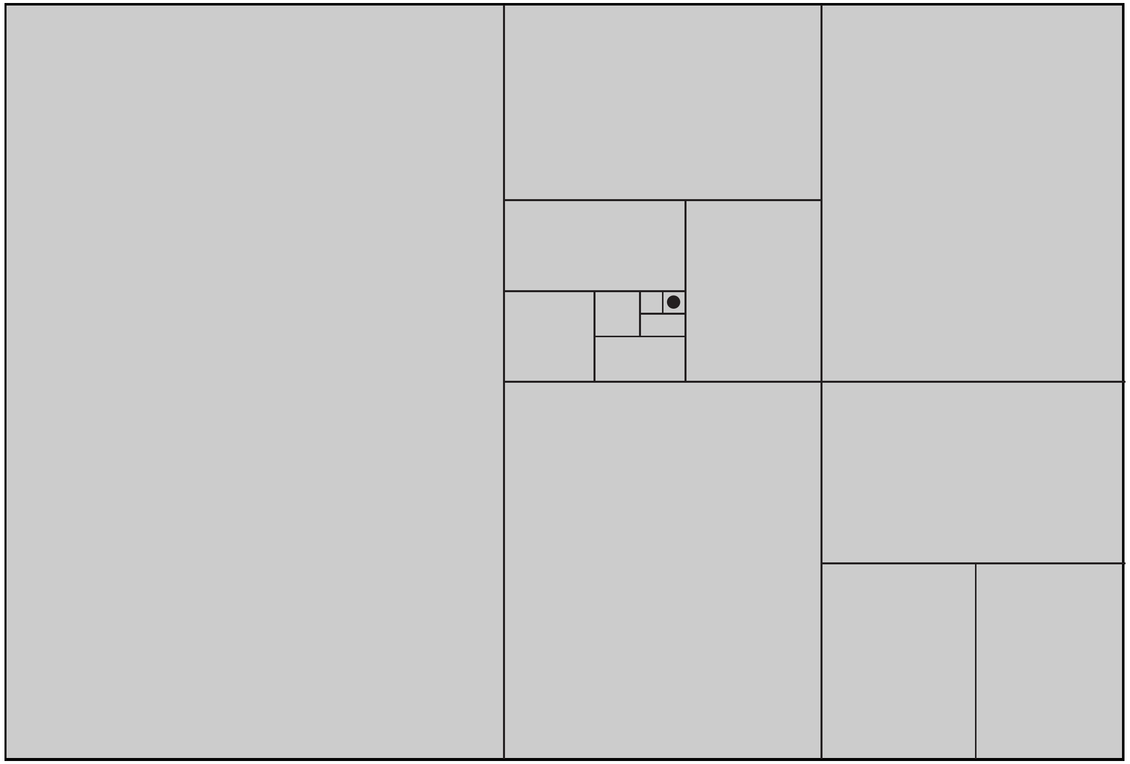
дробим по самой длинной компоненте, т. е. имеющей такой номер l, что

$$\operatorname{wid} \boldsymbol{Y}_l \;=\; \max_i \operatorname{wid} \boldsymbol{Y}_i$$

Интервальный алгоритм глобальной оптимизации



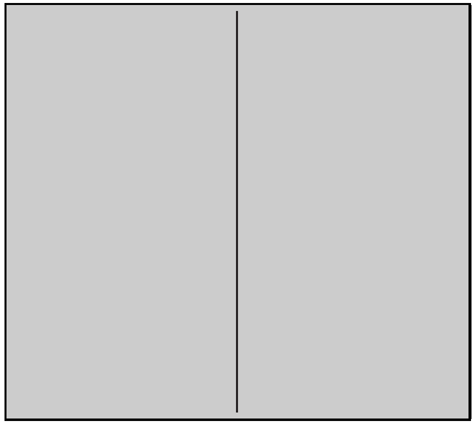
Интервальный алгоритм глобальной оптимизации



— конфигурация двумерной области определения функции
в результате работы алгоритма

Проблема

С ростом размерности эффективность дробления уменьшается ...



Для размерности 2 дробление одной грани кубика пополам уменьшает его диаметр $\approx$ на 21%

Для размерности 10 дробление одной грани кубика пополам уменьшает его диаметр $\approx$ на 3.8%

Модификации

- Учёт монотонности целевой функции.
- Более качественное интервальное расширение целевой функции.
- Локальные процедуры минимизации.
- Отсеивание бесперспективных подбрусов (отбраковка по значению).
- Удаление бесперспективных частей подбрусов («сжатие» брусов).

Отсеивание бесперспективных подбрусов

(отбраковка по значению)

Пусть $\boxdot\boldsymbol{Y}$ — какая-то точка из $\boldsymbol{Y}$, и мы вычисляем величины $F(\boxdot\boldsymbol{Y})$. Ясно, что

$$F(\boxdot\boldsymbol{Y}) \;\geq\; \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})},$$

и значения $F(\boxdot\boldsymbol{Y})$ приближают искомый $\min\limits_{x\in\boldsymbol{X}} F(x)$ сверху:

если для каждого шага алгоритма мы определим величину

$$\omega \;:=\; \min F(\boxdot\boldsymbol{Y}),$$

то всегда

$$\min_{x\in\boldsymbol{X}} F(x) \;\leq\; \omega.$$

Отсеивание бесперспективных подбрусов

(отбраковка по значению)

Подбрус $\boldsymbol{Y} \subseteq \boldsymbol{X}$, который удовлетворяет

$$\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})} \; > \; \omega$$

не может содержать глобального минимума

Ещё один критерий остановки

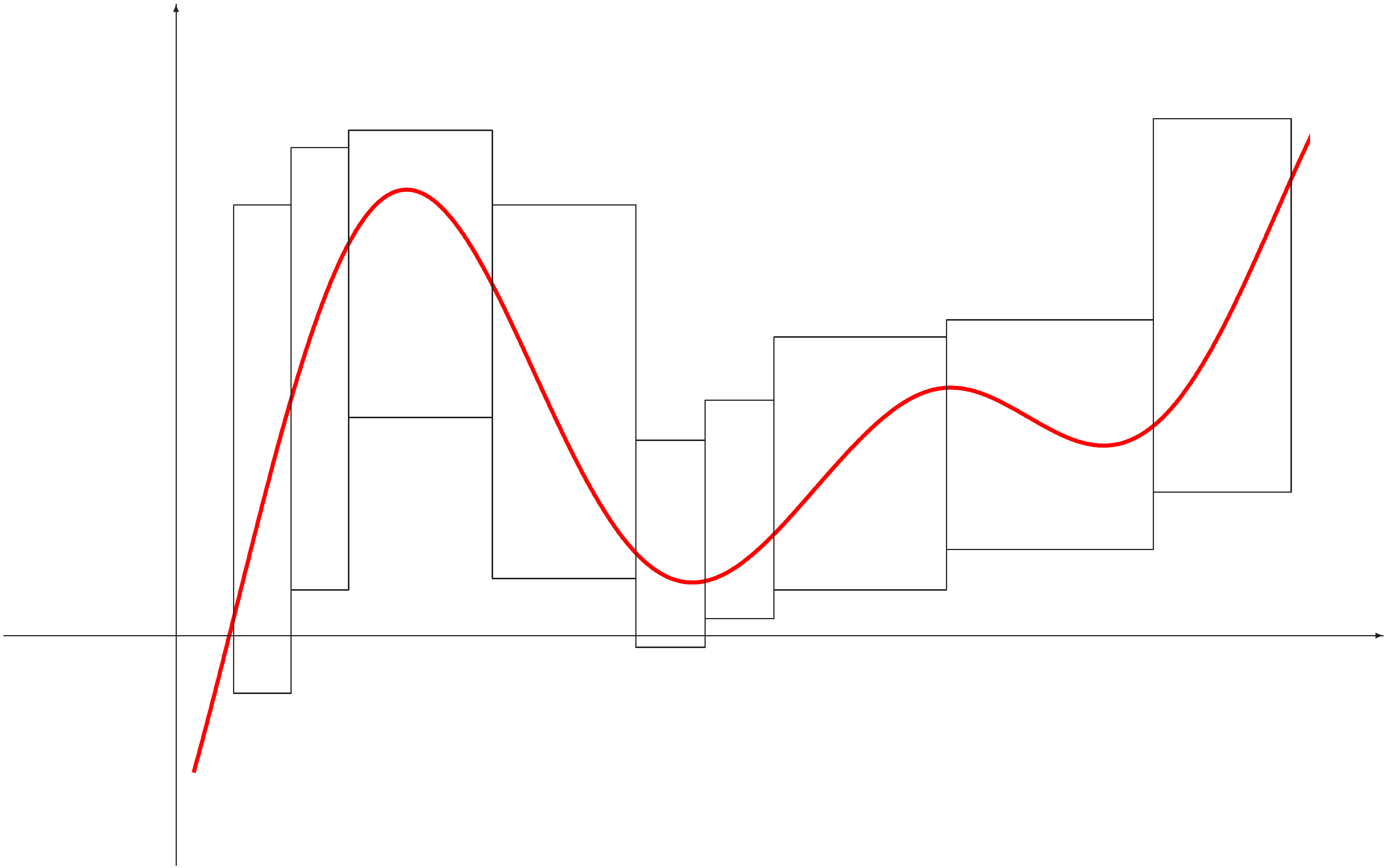
если $\boldsymbol{Y}$ — ведущий брус, то

$$\underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})} \; \leq \; \min_{x \in \boldsymbol{X}} F(x)$$

и теперь можно прервать итерации,

когда разность $(\omega - \underline{\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Y})})$ достаточно мала.

Отсеивание бесперспективных подбрусов



Удаление бесперспективных частей подбрусов

(«сжатие» брусов)

Во внутренних точках исходного бруса $\boldsymbol{X}$, доставляющих экстремум целевой функции F, производная F' зануляется.

Можем удалять из рассмотрения те части внутренних подбрусов $\boldsymbol{X}$, которые заведомо не удовлетворяют условию

$$F'(x) = 0.$$

Это достигается, к примеру, интервальными методами решения уравнений, излагаемыми в Части IV доклада.

Алефельд Г., Херцбергер Ю. *Введение в интервальные вычисления.* – Москва: Мир, 1987.

Neumaier A. *Interval methods for systems of equations.* – Cambridge: Cambridge University Press, 1990.

Kearfott R.B. *Rigorous Global Search: Continuous Problems* – Dordrecht: Kluwer, 1996.

Hansen E., Walster G.W. *Global optimization using interval analysis.* – New York: Marcel Dekker, 2004.

Шарый С.П. *Конечномерный интервальный анализ.* – XYZ: 2010. Электронная книга, доступная на `http://www.nsc.ru/interval`

Интервальные алгоритмы глобальной оптимизации

1) Доказательность результата («гарантированность»):

   получаемая оценка значений глобального минимума гарантированно приближает его снизу и сверху;

   несложная модификация позволяет также находить гарантированные оценки экстремума по аргументу.

2) Адаптивный характер алгоритма:

   его исполнение «подстраивается» под задачу и, в частности, под целевую функцию.

Итоги этой части лекции

1) Оптимизация функций — благодатная почва для приложений интервальных методов.

2) Интервальные методы глобальной оптимзации хорошо работают для задач малой и средней размерности, позволяя надёжно находить глобальный экстремум и доставляющие его аргументы.

3) А если размерность задачи велика?

Часть IV

Глобальное решение уравнений и систем уравнений

Задача решения уравнений и систем уравнений

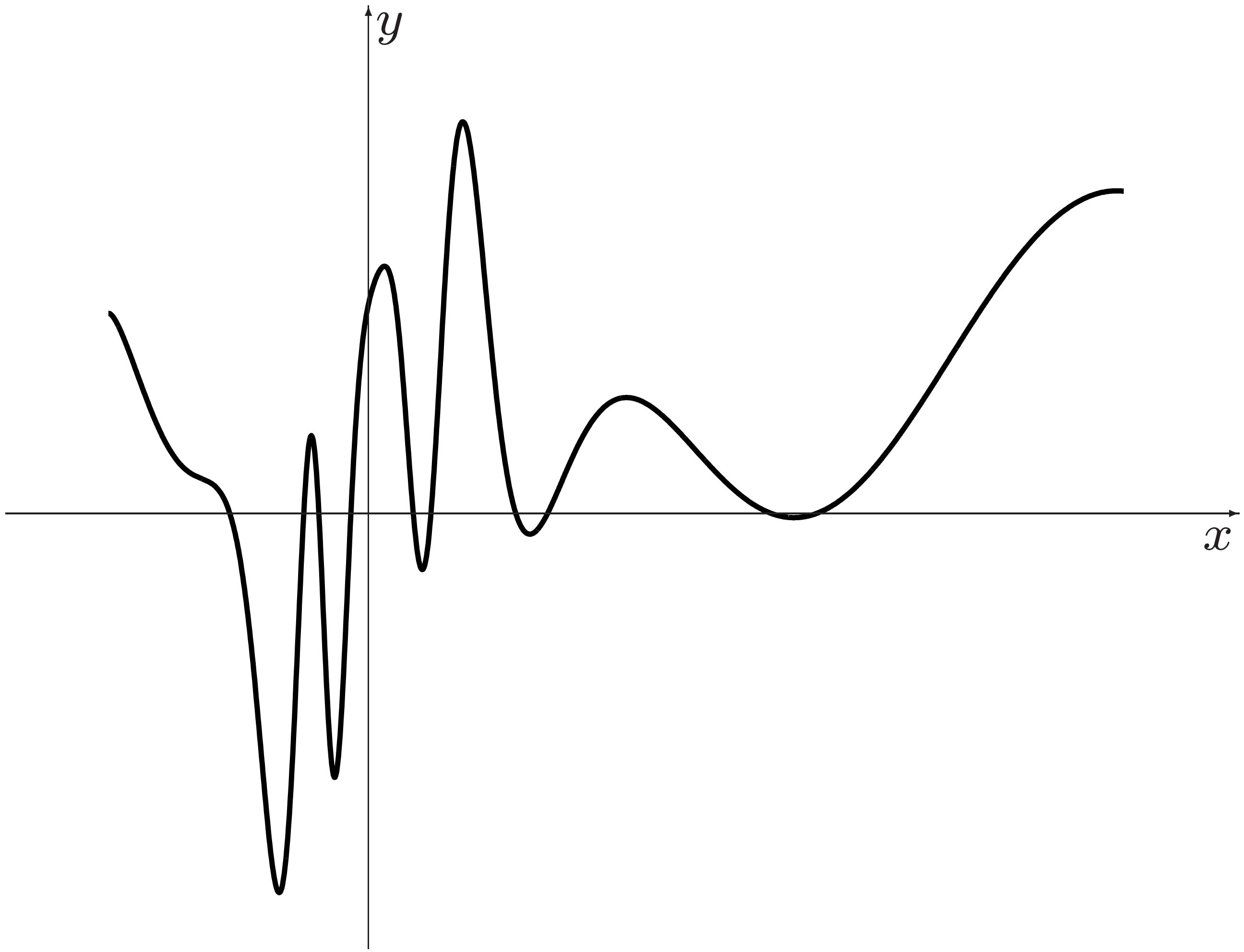
Найти решения системы уравнений

$$\left\{\begin{array}{ccc} F_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ F_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \\ \vdots \quad\quad \ddots \quad\quad \vdots & & \vdots \\ F_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0, \end{array}\right.$$

или, кратко,

$$F(x) = 0,$$

где $F(x) = \Big(F_1(x), F_2(x), \ldots, F_n(x)\Big)^\top$, $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$.



y
x

Традиционные численные методы

Метод простой итерации

Метод Ньютона

Квазиньютоновские методы

. . . .

— *они носят локальный характер!*

Постановка задачи

Найти *все* решения системы уравнений

$$F(x) = 0$$

на данном множестве $D \subseteq \mathbb{R}^n$, определив для них гарантированные двусторонние границы.

— задача доказательного глобального решения.

Традиционные методы глобального решения

Аналитическое исследование

Мультистарт

Методы продолжения

— они имеют ограниченную применимость

Теоретическая основа интервальных численных методов?

Теоретическая основа интервальных численных методов

Ограничиваем область рассмотрения:

$$F(x) = 0 \quad \text{на брусе } \boldsymbol{X},$$

а не «вообще».

Тесты существования решений

$$F(x) \;=\; 0 \qquad \text{на брусе } \boldsymbol{X}$$

Найдём область значений

$$\operatorname{ran}(F, \boldsymbol{X}) \;=\; \{\, F(x) \mid x \in \boldsymbol{X} \,\}$$

функции F на $\boldsymbol{X}$:

- ♣ Если $0 \in \operatorname{ran}(F, \boldsymbol{X})$, то в $\boldsymbol{X}$ имеется решение уравнения $F(x) = 0$.

- ♣ Если $0 \notin \operatorname{ran}(F, \boldsymbol{X})$, то в $\boldsymbol{X}$ нет решений уравнения $F(x) = 0$.

Тесты существования решений

$$F(x) = 0 \qquad \text{на брусе } \boldsymbol{X}$$

Точное нахождение области значений NP-трудно,
поэтому актуальны упрощённые тесты:

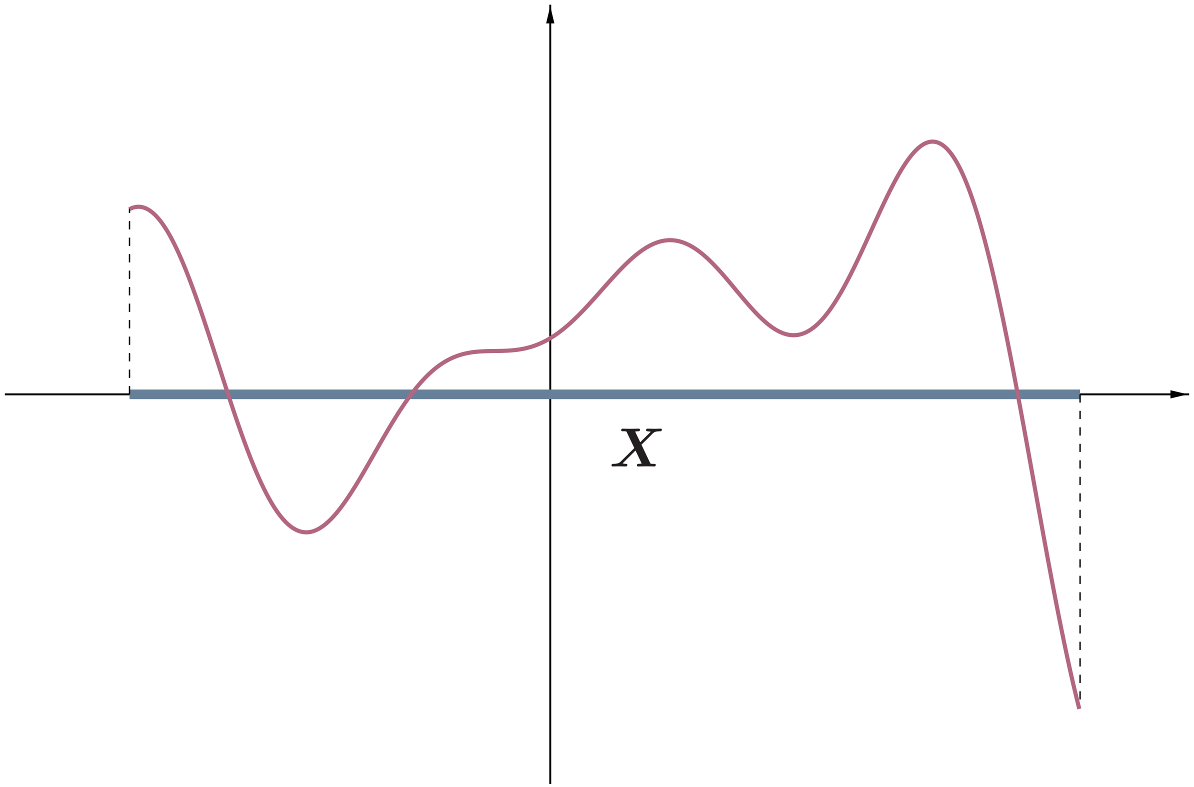
- ♣ Найдём интервальное расширение $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$ функции F на $\boldsymbol{X}$. Если $0 \notin \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$, то на $\boldsymbol{X}$ нет решений уравнения.

- ♣ Если внутренняя интервальная оценка области значений функции F на $\boldsymbol{X}$ содержит нуль, то в $\boldsymbol{X}$ есть решение.

Теорема Больцано-Коши

Пусть функция $F:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ непрерывна на интервале $\boldsymbol{X}$ из $\mathbb{R}$ и на его концах принимает значения разных знаков.

Тогда внутри интервала существует нуль функции F, т.е. точка $\tilde{x}$, в которой $F(\tilde{x})=0$.



Теорема Миранды

— обобщение теоремы Больцано-Коши

C. Miranda
Un’ osservatione su un teorema di Brouwer
– Bollet. Unione Mat. Ital. Serie II.
1940 год, том 3, стр. 5–7.

Карло Миранда (1912–1982) — итальянский математик

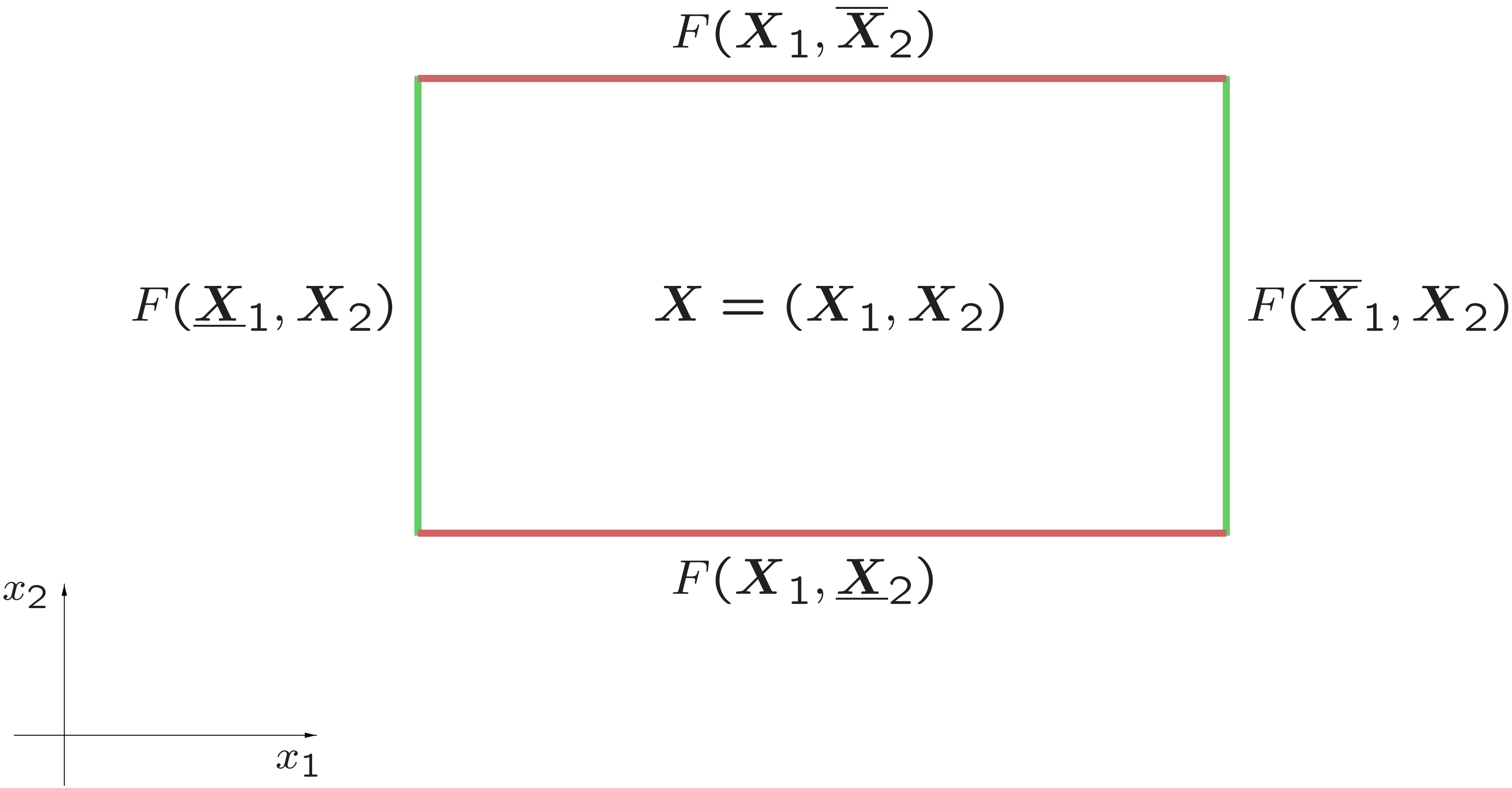
Теорема Миранды

Пусть $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, $F(x) = \bigl(F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x)\bigr)^\top$ — функция, непрерывная на брусе $\boldsymbol{X} \subset \mathbb{R}^n$ со сторонами, параллельными координатным осям, и для каждого $i = 1, 2, \dots, n$ области значений компонент F_i на i-ых противоположных гранях бруса $\boldsymbol{X}$, имеют разные знаки:

$$\operatorname{ran}\bigl(F_i, (\boldsymbol{X}_1, \dots, \boldsymbol{X}_{i-1}, \underline{\boldsymbol{X}}_i, \boldsymbol{X}_{i+1}, \dots, \boldsymbol{X}_n\bigr) \times$$
$$\operatorname{ran}\bigl(F_i, (\boldsymbol{X}_1, \dots, \boldsymbol{X}_{i-1}, \overline{\boldsymbol{X}}_i, \boldsymbol{X}_{i+1}, \dots, \boldsymbol{X}_n)\bigr) < 0.$$

Тогда на брусе $\boldsymbol{X}$ существует нуль функции F, т. е. точка $\tilde{x}$, в которой $F(\tilde{x}) = 0$.

Теорема Миранды



Теорема Миранды

Особенности применения —

- специальная форма множества, на котором исследуется существование решения — брус в $\mathbb{R}^n$ со сторонами, параллельными координатным осям, т. е. интервальный вектор,

- необходимость оценивать область значений функции на брусах в $\mathbb{R}^{n-1}$.

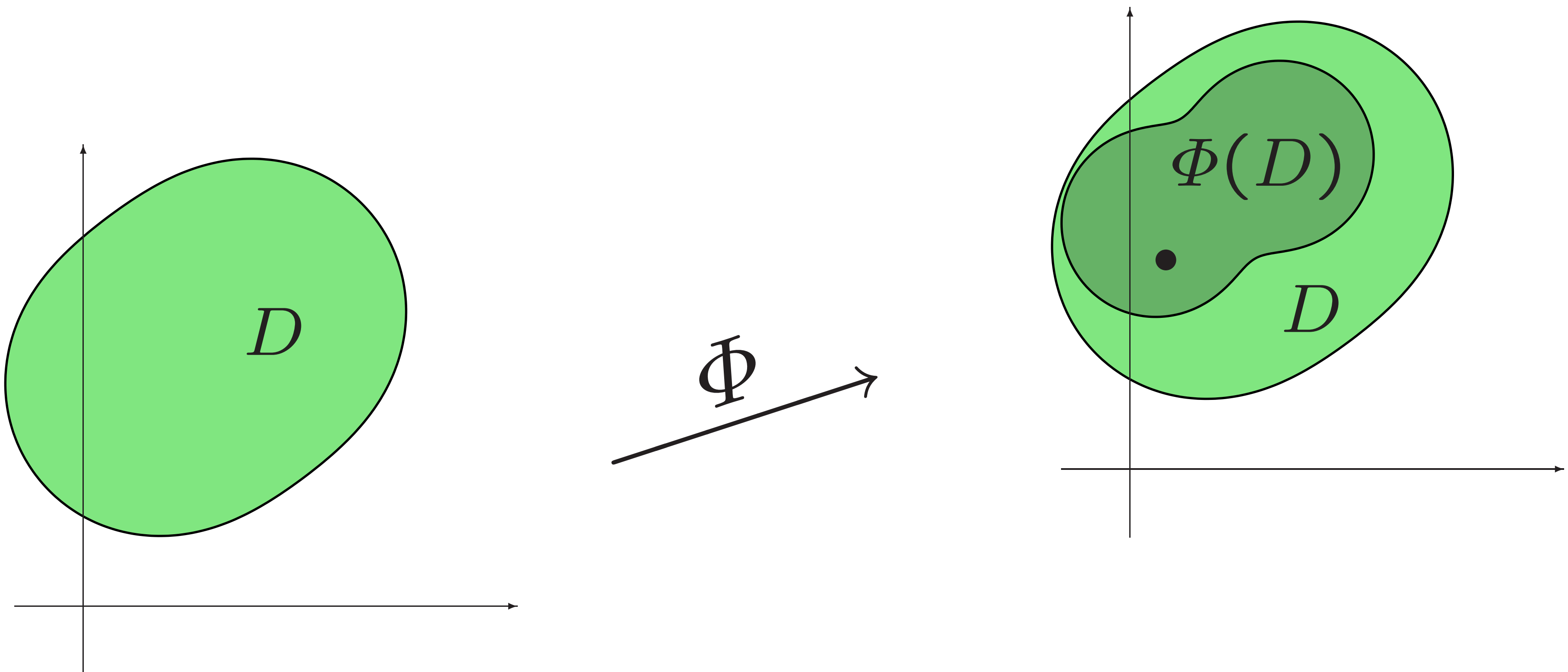
Теорема Брауэра о неподвижной точке

Пусть D — выпуклый компакт в $\mathbb{R}^n$. Если непрерывное отображение $\varPhi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ переводит D в себя, т.е.

$$\varPhi(D) \subseteq D,$$

то оно имеет на D неподвижную точку $x^\star$, такую что

$$x^\star = \varPhi(x^\star).$$



Тесты существования решений

Перепишем исходную систему $F(x) = 0$ в рекуррентной форме:

$$x = G(x).$$

- Решения могут лежать лишь в пересечении $\boldsymbol{X} \cap G(\boldsymbol{X})$.

  Если для бруса $\boldsymbol{X}$ выполнено

  $$G(\boldsymbol{X}) \cap \boldsymbol{X} = \emptyset,$$

  то в $\boldsymbol{X}$ нет решений системы.

- Если для бруса $\boldsymbol{X}$ выполнено

  $$G(\boldsymbol{X}) \subseteq \boldsymbol{X},$$

  то в $\boldsymbol{X}$ по теореме Брауэра есть решение системы.

Глобальное решение уравнений

Если брус $\boldsymbol{X}$ недостаточно узок, то на нём неприменимы локальные методы. Тогда — принудительное дробление $\boldsymbol{X}$ на более мелкие подбрусы, для которых наши тесты более успешны.

Бисекция —

$$
\begin{tikzcd}[row sep=small]
 & \boldsymbol{X}' = \big(\,\boldsymbol{X}_1, \ldots, [\,\underline{\boldsymbol{X}}_k, \operatorname{mid}\boldsymbol{X}_k\,], \ldots, \boldsymbol{X}_n\big) \\
\boldsymbol{X} \arrow[ur] \arrow[dr] & \\
 & \boldsymbol{X}'' = \big(\,\boldsymbol{X}_1, \ldots, [\,\operatorname{mid}\boldsymbol{X}_k, \overline{\boldsymbol{X}}_k\,], \ldots, \boldsymbol{X}_n\big)
\end{tikzcd}
$$

$\boldsymbol{X}'$ и $\boldsymbol{X}''$ — *потомки бруса* $\boldsymbol{X}$

Глобальное решение уравнений

Организуем *рабочий список* $\mathcal{L}$ из всех потомков $\boldsymbol{X}$, подозрительных на содержание решений.

Алгоритм глобального решения состоит из

– выбора бруса из рабочего списка $\mathcal{L}$,

– дробления бруса на потомки,

– проверки существования решений в брусах-потомках.

– удаления частей брусов, которые не содержат решений.

Глобальное решение уравнений

Пусть δ — желаемая точность локализации решений.

Ограничения на вычислительные ресурсы могут воспрепятствовать решению задачи «до конца»:

- размеры бруса $< \delta$, но нам не удается ни доказать существование на нем решений, ни показать их отсутствие;

- размеры бруса $\geq \delta$, но вычислительные ресурсы не позволяют производить его обработку дальше: исчерпались время либо память ЭВМ и т.п.

Результат работы

алгоритма глобального доказательного решения уравнений

— пользователю выдаются три списка брусов:

`НавернякаРешения`, состоящий из брусов шириной меньше δ, которые гарантированно содержат решения,

`ВозможноРешения`, состоящий из брусов шириной меньше δ, подозрительных на содержание решения,

`Недообработанные`, состоящий брусов, которые имеют ширину не меньше δ, но для которых не доказано ни существование решений, ни их отсутствие.

такие что все решения рассматриваемой системы уравнений, не принадлежащие брусам из списка `НавернякаРешения`, содержатся в брусах из списков `ВозможноРешения` и `Недообработанные`.

Простейший интервальный алгоритм глобального доказательного решения уравнений

Вход

Система уравнений $F(x) = 0$. Брус $\boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$.

Интервальное расширение $\boldsymbol{F} : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}^n$ функции F.

Заданная точность $\delta > 0$ локализации решений системы.

Выход

Список `НавернякаРешения` из брусов размера менее δ, которые гарантированно содержат решения системы в $\boldsymbol{X}$.

Список `ВозможноРешения` из брусов размера менее δ, которые могут содержать решения системы в $\boldsymbol{X}$.

Список `Недообработанные` из брусов размера более δ, которые могут содержать решения системы в $\boldsymbol{X}$.

Алгоритм

инициализируем список $\mathcal{L}$ исходным брусом $\boldsymbol{X}$;

DO WHILE ($\mathcal{L} \neq \varnothing$ и не исчерпаны ресурсы ЭВМ)

  извлекаем из списка $\mathcal{L}$ брус $\boldsymbol{Y}$;

  применяем к $\boldsymbol{Y}$ тест существования решения ;

  IF (в $\boldsymbol{Y}$ доказано отсутствие решений) **THEN**

    удаляем брус $\boldsymbol{Y}$ из рассмотрения

  ELSE

    IF (размер бруса $\boldsymbol{Y}$) $< \delta$ **THEN**

      заносим $\boldsymbol{Y}$ в соответствующий из списков

      `НаверняkaРешения` или `ВозможноРешения`

    ELSE

      рассекаем $\boldsymbol{Y}$ на потомки $\boldsymbol{Y}'$ и $\boldsymbol{Y}''$

      и заносим их в рабочий список $\mathcal{L}$

    END IF

  END IF

END DO

все брусы из $\mathcal{L}$ перемещаем в список `Недообработанные` ;

Где почитать?

Moore R.E., Kearfott R.B., Cloud M.J. *Introduction to Interval Analysis.* – Philadelphia: SIAM, 2009.

Шарый С.П. *Конечномерный интервальный анализ.* – XYZ: 2010. Электронная книга, доступная на `http://www.nsc.ru/interval`

Neumaier A. *Interval Methods for Systems of Equations.* – Cambridge: Cambridge University Press, 1990.

Hansen E. *Global Optimization Using Interval Analysis.* – New York: Marcel Dekker, 1992.

Kearfott R.B. *Rigorous Global Search: Continuous Problems.* – Dordrecht: Kluwer, 1996.

Итоги этой части лекции

1) Интервальные методы — мощное средство как локального, так и глобального доказательного решения уравнений и систем уравнений.

2) . . .

Спасибо за внимание

Спасибо за внимание

До встречи на мастер-классе!