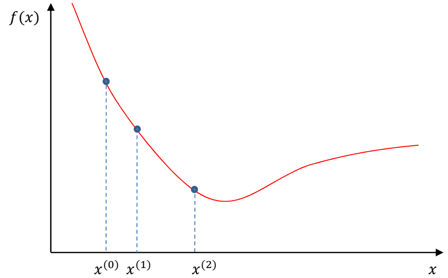
Μέθοδοι μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης

Δ. Γ. Παπαγεωργίου
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

dpapageo@uoi.gr
http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo

Βασικές αρχές μεθόδων ελαχιστοποίησης

- Οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης είναι επαναληπτικές.
- Ξεκινώντας από μια αρχική προσέγγιση του ελαχίστου (την συμβολίζουμε $x^{(0)}$) παράγουν διαδοχικές προσεγγίσεις $x^{(1)}, x^{(2)} \cdots x^{(k)}$ που συγκλίνουν στο ελάχιστο.

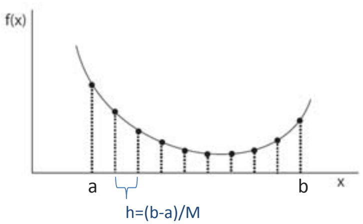


Υπάρχουν δύο βασικές κατηγορίες μεθόδων:

- Μέθοδοι που δεν χρησιμοποιούν τις παραγώγους, αλλά μόνο τις τιμές της συνάρτησης.
- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν τις παραγώγους (πρώτες ή/και δεύτερες) της συνάρτησης.

Αναζήτηση με διαμέριση

Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$ και ένα διάστημα $[a, b]$ μέσα στο οποίο γνωρίζουμε ότι βρίσκεται το ελάχιστο.



Αναζήτηση με διαμέριση:

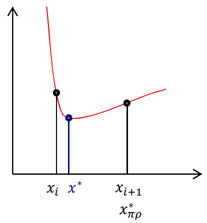
- Χωρίζουμε το διάστημα $[a, b]$ σε M ίσα υποδιαστήματα το καθένα με μήκος
$$h = \frac{b-a}{M}$$
- Ονομάζουμε τα σημεία $x_0, x_1, x_2, \cdots x_M$
$$x_0 = a, \qquad x_M = b$$
- Το κάθε σημείο x_i δίνεται από: $x_i = a + ih \qquad i = 0 \dots M$
- Υπολογίζουμε την τιμή της συνάρτησης σε κάθε σημείο: $f_i = f(x_i)$
- Επιλέγουμε ως ελάχιστο $x^*_{\pi\rho}$ το σημείο x_i με την μικρότερη τιμή f_i

Αναζήτηση με διαμέριση

Σφάλμα στην εύρεση του ελαχίστου

- Η αναζήτηση με διαμέριση βρίσκει μια προσεγγιστική λύση.
- Τι πρέπει να κάνουμε για να βρούμε μια ακριβέστερη προσέγγιση του ελαχίστου;

  → Πυκνότερη διαμέριση.
- Ποιο είναι το σφάλμα που κάνουμε χρησιμοποιώντας αυτή τη μέθοδο;
$$\sigma = |x^* - x^*_{\pi\rho}|$$



Μέγιστο σφάλμα της μεθόδου
$$\sigma = h = \frac{b-a}{M}$$

Αναζήτηση με διαμέριση

Σφάλμα στην εύρεση του ελαχίστου

- Πόσες διαμερίσεις χρειάζονται για να βρούμε το ελάχιστο με προκαθορισμένο σφάλμα ;

$$M = \frac{b-a}{\sigma}$$

- Παράδειγμα:
Αν $a = 0, b = 1, \sigma = 10^{-6}$

$$M = \frac{b-a}{\sigma} = \frac{1}{10^{-6}} = 10^6$$

- Ποιο είναι το μικρότερο δυνατό σφάλμα που μπορούμε να απαιτήσουμε ;
- Εξαρτάται από τη σχετική ακρίβεια του υπολογιστή.
Απλή ακρίβεια $\approx 10^{-7}$
Διπλή ακρίβεια $\approx 10^{-15}$

Αναζήτηση με διαμέριση

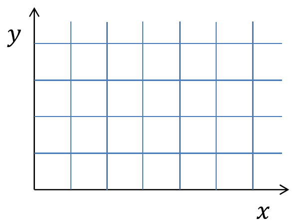
Υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται

- Πως μετράμε τον υπολογιστικό χρόνο που απαιτεί η αναζήτηση με διαμέριση;
- Πως συγκρίνουμε δύο διαφορετικούς αλγορίθμους για να βρούμε τον πιο αποδοτικό ;
- Σε όλους τους αλγορίθμους ελαχιστοποίησης γίνονται δύο ειδών υπολογισμοί:
  - Υπολογισμοί της αντικειμενικής συνάρτησης.
  - Λειτουργίες που αφορούν καθαυτό τον αλγόριθμο (πχ. εύρεση της μικρότερης τιμής)
- Θεωρούμε ότι ο χρόνος που απαιτείται για λειτουργίες του αλγορίθμου είναι μικρός.
- Χρησιμοποιούμε το **πλήθος υπολογισμών της αντικειμενικής συνάρτησης** για να αποτιμήσουμε την αποδοτικότητα κάθε αλγορίθμου ελαχιστοποίησης.
- Για μια διαμέριση M διαστημάτων απαιτούνται $M+1$ υπολογισμοί της συνάρτησης $f(x)$

Αναζήτηση με διαμέριση

Γενίκευση σε πολλές διαστάσεις

- Θεωρήστε μια συνάρτηση 2 μεταβλητών $f(x, y)$
- Πρέπει να κατασκευάσουμε διαμέριση στον άξονα x και στον άξονα y



- Συνολικά απαιτούνται $(M+1)^2$ υπολογισμοί της συνάρτησης.

Παράδειγμα:

- Πόσος χρόνος απαιτείται για μια συνάρτηση 5 μεταβλητών με διαμέριση 1000 διαστημάτων σε κάθε μεταβλητή, όταν ένας υπολογισμός της συνάρτησης διαρκεί 0.01ms ;
- Οι υπολογισμοί της συνάρτησης που απαιτούνται είναι:

$$(1000+1)^5 \approx 10^{15}$$

- Ο συνολικός χρόνος είναι:
$10^{15} \cdot 0.01\text{ms} = 10^{10}\text{s} \approx 116 \text{ days}$

Η αναζήτηση με διαμέριση είναι απαγορευτική για πολλές διαστάσεις.

Αναζήτηση με διαμέριση

Πλεονεκτήματα

- Εύκολη υλοποίηση
- Χρησιμοποιεί μόνο τις τιμές της συνάρτησης

Μειονεκτήματα

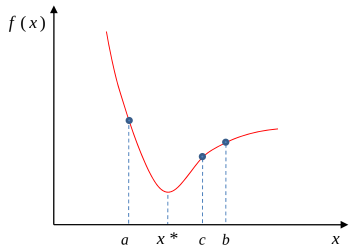
- Απαιτούνται πολλοί υπολογισμοί της συνάρτησης για μικρή έστω ακρίβεια
- Πρακτικά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλές διαστάσεις

Διαστήματα αβεβαιότητας

Διάστημα αβεβαιότητας

Ένα διάστημα $[a, b]$ που φράσει τη θέση του ελαχίστου, δηλαδή

$$a \leq x^* \leq b$$



Το διάστημα $[a, b]$ συνοδεύεται από ένα τρίτο σημείο c (σημείο ελέγχου), που βρίσκεται εντός του διαστήματος $a < c < b$ και τέτοιο ώστε:

$$f(c) < f(a)$$
$$f(c) < f(b)$$

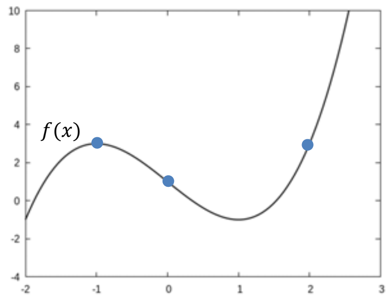
Γράφουμε: $[a, b], c$

Παράδειγμα

Δίνεται η συνάρτηση

$$f(x) = x^3 - 3x + 1$$

Εξετάστε αν το διάστημα [-1,2],0 αποτελεί διάστημα αβεβαιότητας



Βρίσκουμε τις τιμές της συνάρτησης στα τρία σημεία:

$$f(-1) = 3$$
$$f(0) = 1$$
$$f(2) = 3$$

Πρέπει:

$$f(0) < f(-1)$$
$$f(0) < f(2)$$

Οι συνθήκες ισχύουν, άρα πρόκειται για διάστημα αβεβαιότητας.

Προσέγγιση του ελαχίστου σε διάστημα αβεβαιότητας

Αν το μήκος του διαστήματος $b - a$ είναι μικρό, **τότε**

μια καλή προσέγγιση του ελαχιστοποιητή x^* είναι:

$$x^* \approx \frac{b + a}{2}$$

με σφάλμα (το πολύ):

$$\sigma = \frac{b - a}{2}$$

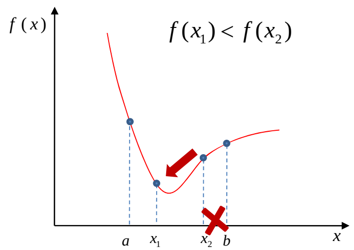
αλλιώς

πρέπει να μικρύνουμε το διάστημα αβεβαιότητας μέχρι να πετύχουμε ικανοποιητικό σφάλμα.

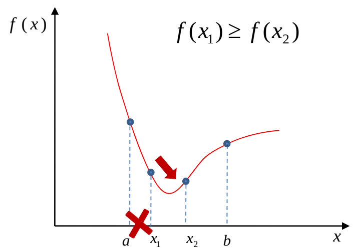
Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας

Χρησιμοποιώντας μόνο τιμές της συνάρτησης

- Θεωρούμε δύο νέα σημεία x_1, x_2 εντός του διαστήματος $[a, b]$ τέτοια ώστε $a < x_1 < x_2 < b$
- Υπολογίζουμε τις τιμές της συνάρτησης $f(x_1), f(x_2)$
- Συγκρίνουμε τις τιμές $f(x_1), f(x_2)$ και απορρίπτουμε ένα τμήμα του διαστήματος.



Νέο διάστημα αβεβαιότητας: $[\alpha, x_2]$



Νέο διάστημα αβεβαιότητας: $[x_1, b]$

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας

Αλγόριθμος

Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$ και διάστημα αβεβαιότητας $[a, b]$

1. Θεωρούμε δύο νέα σημεία x_1, x_2 εντός του διαστήματος $[a, b]$ τέτοια ώστε $a < x_1 < x_2 < b$
2. Υπολογίζουμε τις τιμές της συνάρτησης $f(x_1), f(x_2)$
3. Έλεγχος
   a. Αν $f(x_1) < f(x_2)$ τότε θέτουμε ως νέο διάστημα το $[a, x_2]$
   b. Αν $f(x_1) \geq f(x_2)$ τότε θέτουμε ως νέο διάστημα το $[x_1, b]$
4. Επαναλαμβάνουμε από το βήμα 1

- Πότε τερματίζεται η διαδικασία ;
- Πως επιλέγουμε τα εσωτερικά σημεία ;
- Πως μετράμε την απόδοση του αλγορίθμου ;

Κριτήριο τερματισμού

Η διαδικασία τερματίζεται όταν το σφάλμα γίνει μικρότερο από μια προκαθορισμένη τιμή σ, δηλαδή:

$$\text{σφάλμα} = \frac{b-a}{2} < \sigma \quad \Rightarrow \quad b - a < 2\sigma$$

Ο έλεγχος γίνεται πρίν την έναρξη κάθε επανάληψης (πριν πάρουμε τα δύο νέα σημεία)

Πως επιλέγουμε τα εσωτερικά σημεία

Ο τρόπος επιλογής των δύο εσωτερικών σημείων οδηγεί σε αλγορίθμους με διαφορετικές ιδιότητες:

- Αναζήτηση ίσων διαστημάτων
- Αναζήτηση διχοτόμησης
- Αναζήτηση Fibonacci
- Αναζήτηση χρυσής τομής

Πως μετράμε την αποδοτικότητα

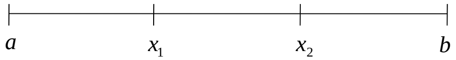
Για να αξιολογήσουμε τους διαφορετικούς τρόπους επιλογής των διαφορετικών σημείων ορίζουμε το συντελεστή μείωσης του διαστήματος αβεβαιότητας:

$$r(n) = \frac{\text{Μήκος τελικού διαστήματος μετά από n κλήσεις της f(x)}}{\text{Μήκος αρχικού διαστήματος}}$$

Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

Διαλέγουμε τα εσωτερικά σημεία έτσι ώστε το διάστημα αβεβαιότητας να διαιρείται σε τρία ίσα τμήματα, δηλαδή:

$$x_1 = a + \frac{1}{3}(b-a) \qquad x_2 = a + \frac{2}{3}(b-a)$$



Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

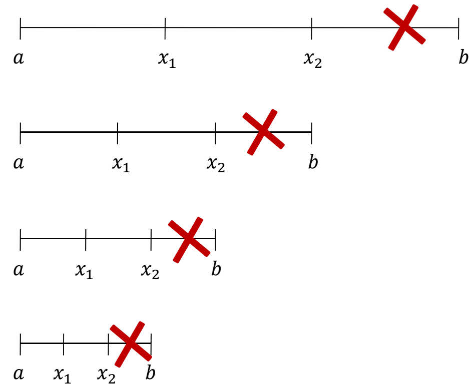
Επανάληψη   Αναπαράσταση του διαστήματος αβεβαιότητας

$k = 0$

$k = 1$

$k = 2$

$k = 3$



Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

Πως μικραίνει το διάστημα αβεβαιότητας

Επανάληψη	Μήκος διαστήματος	Πλήθος κλήσεων της $f(x)$
0	$b-a$	
1	$\frac{2}{3}(b-a)$	2
2	$\left(\frac{2}{3}\right)^2(b-a)$	4
3	$\left(\frac{2}{3}\right)^3(b-a)$	6
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
k	$\left(\frac{2}{3}\right)^k(b-a)$	$2k$

$$\text{σφάλμα} = \frac{\text{μήκος τελικού διαστήματος}}{2} = \frac{\left(\frac{2}{3}\right)^k(b-a)}{2}$$

Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

Πόσες επαναλήψεις χρειαζόμαστε ;

$$\sigma = \frac{\left(\frac{2}{3}\right)^k(b-a)}{2} \Rightarrow$$

$$\frac{2\sigma}{b-a} = \left(\frac{2}{3}\right)^k \Rightarrow$$

$$\log\frac{2\sigma}{b-a} = \log\left(\frac{2}{3}\right)^k \Rightarrow$$

$$\log\frac{2\sigma}{b-a} = k\log\frac{2}{3} \Rightarrow$$

$$\boxed{k = \frac{\log\frac{2\sigma}{b-a}}{\log\frac{2}{3}}}$$

Αν προκαθορίσουμε το μέγιστο αποδεκτό σφάλμα σ τότε το πλήθος των επαναλήψεων:

- Εξαρτάται μόνο από το μήκος του αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας $b-a$
- Είναι ίδιο για οποιοδήποτε συνάρτηση $f(x)$
- Μπορεί να καθοριστεί εκ των προτέρων

Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

Συντελεστής απόδοσης

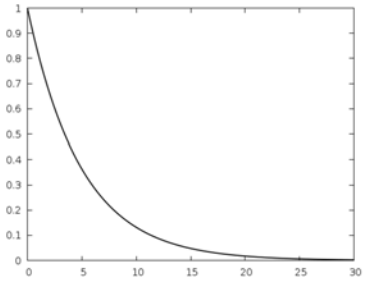
$$r(n) = \frac{\text{Μήκος διαστήματος μετά από n κλήσεις της f(x)}}{\text{Αρχικό μήκος διαστήματος}}$$

Επειδή κάθε επανάληψη χρειάζεται δύο υπολογισμούς της $f(x)$, μετά από n κλήσεις έχουν γίνει $\frac{n}{2}$ επαναλήψεις. Μετά από $\frac{n}{2}$ επαναλήψεις το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας είναι:

$$\left(\frac{2}{3}\right)^{n/2} (b-a)$$

Συνεπώς ο συντελεστής απόδοσης είναι:

$$r(n) = \frac{\left(\frac{2}{3}\right)^{n/2} (b-a)}{b-a} = \left(\frac{2}{3}\right)^{n/2}$$



Παράδειγμα

Πόσες επαναλήψεις της μεθόδου των ίσων διαστημάτων χρειάζονται για να βρούμε το ελάχιστο με σφάλμα 10^{-6} όταν το διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[0,4]$;

Εφαρμόζουμε τη σχέση

$$k = \frac{\log \frac{2\sigma}{b-a}}{\log \frac{2}{3}} =$$

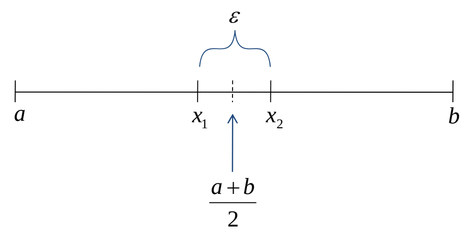
$$\frac{\log \frac{2 \times 10^{-6}}{4-0}}{\log \frac{2}{3}} =$$

36

Αναζήτηση διχοτόμησης

Διαλέγουμε τα εσωτερικά σημεία κοντά στο μέσο του διαστήματος αβεβαιότητας

$$x_1 = \frac{a+b}{2} - \frac{\varepsilon}{2} \qquad x_2 = \frac{a+b}{2} + \frac{\varepsilon}{2}$$



Αναζήτηση διχοτόμησης

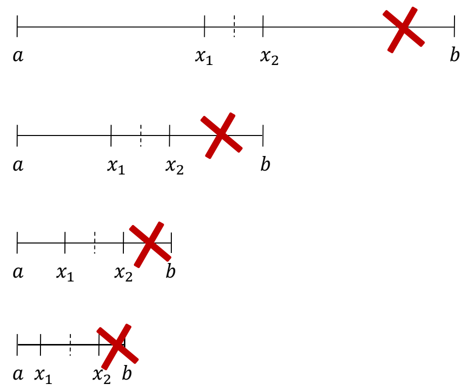
Επανάληψη | Αναπαράσταση του διαστήματος αβεβαιότητας

$k = 0$

$k = 1$

$k = 2$

$k = 3$



Αναζήτηση διχοτόμησης

Πως μικραίνει το διάστημα αβεβαιότητας

Επανάληψη	Μήκος διαστήματος
0	$b-a$
1	$\frac{1}{2}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}$
2	$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\right]+\frac{\varepsilon}{2} \quad = \frac{1}{4}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)$
3	$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{4}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)\right]+\frac{\varepsilon}{2} \quad = \frac{1}{8}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)$
$\vdots$	$\vdots$
k	$\frac{1}{2^k}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\cdots\frac{1}{2^{k-1}}\right)$

Αναζήτηση διχοτόμησης

Πως μικραίνει το διάστημα αβεβαιότητας

Μετά από k επαναλήψεις το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας είναι:

$$\frac{1}{2^k}(b-a)+\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\cdots\frac{1}{2^{k-1}}\right)$$

Όμως ισχύει ότι (ταυτότητα):

$$1-x^k=(1-x)\left(1+x+x^2+\cdots x^{k-1}\right) \Rightarrow$$

$$\left(1+x+x^2+\cdots x^{k-1}\right)=\frac{1-x^k}{1-x}$$

Στην περίπτωσή μας $x=\frac{1}{2}$ Συνεπώς:

$$\frac{\varepsilon}{2}\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\cdots\frac{1}{2^{k-1}}\right)=\frac{\varepsilon}{2}\frac{1-\frac{1}{2^k}}{1-\frac{1}{2}}=\varepsilon\left(1-\frac{1}{2^k}\right)$$

Αναζήτηση διχοτόμησης

Πως μικραίνει το διάστημα αβεβαιότητας

Τελικά το μήκος του διαστήματος μετά από k επαναλήψεις είναι:

$$\frac{1}{2^k}(b-a)+\varepsilon\left(1-\frac{1}{2^k}\right)$$

Παρατηρήστε ότι όταν $k\to\infty$ τότε το μήκος $\to\ \varepsilon$

Συνεπώς το τελικό διάστημα αβεβαιότητας δεν μπορεί να γίνει μικρότερο από ε

Αναζήτηση διχοτόμησης

Πόσες επαναλήψεις χρειαζόμαστε ;

$$\text{σφάλμα}=\frac{\text{μήκος τελικού διαστήματος}}{2}=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2^k}(b-a)+\varepsilon\left(1-\frac{1}{2^k}\right)\right]=\sigma$$

Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το ε είναι μικρό, οπότε γράφουμε:

$$\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2^k}(b-a)\right]=\sigma \;\Rightarrow\; \frac{1}{2^k}=\frac{2\sigma}{b-a} \;\Rightarrow\; \log\frac{1}{2^k}=\log\frac{2\sigma}{b-a} \;\Rightarrow$$

$$k\log\frac{1}{2}=\log\frac{2\sigma}{b-a} \;\Rightarrow\; \boxed{k=\frac{\log\frac{2\sigma}{b-a}}{\log\frac{1}{2}}}$$

Παράδειγμα

Πόσες επαναλήψεις της μεθόδου αναζήτησης με διχοτόμηση χρειάζονται για να βρούμε το ελάχιστο με σφάλμα 10^{-6} όταν το διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[0,4]$;

Εφαρμόζουμε τη σχέση

$$k = \frac{\log \frac{2\sigma}{b-a}}{\log \frac{1}{2}}$$

$$\frac{\log \frac{2 \times 10^{-6}}{4-0}}{\log \frac{1}{2}} =$$

21

Αναζήτηση διχοτόμησης

Συντελεστής απόδοσης

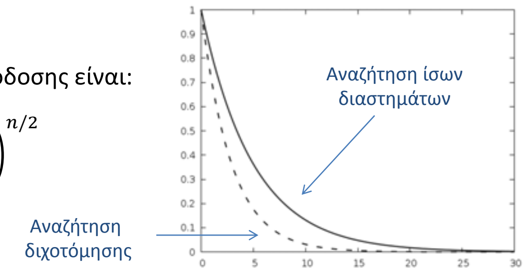
$$r(n) = \frac{\text{Μήκος διαστήματος μετά από n κλήσεις της f(x)}}{\text{Αρχικό μήκος διαστήματος}}$$

Επειδή κάθε επανάληψη χρειάζεται δύο υπολογισμούς της $f(x)$, μετά από n κλήσεις έχουν γίνει $\frac{n}{2}$ επαναλήψεις. Μετά από $\frac{n}{2}$ επαναλήψεις το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας είναι:

$$\approx \frac{1}{2^{n/2}}(b-a)$$

Συνεπώς ο συντελεστής απόδοσης είναι:

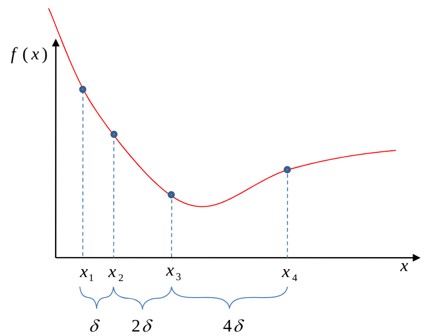
$$r(n) = \frac{\frac{1}{2^{n/2}}(b-a)}{b-a} = \left(\frac{1}{2}\right)^{n/2}$$



Εύρεση αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας

Εύρεση αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας

1. Δίνεται μια τιμή εκκίνησης x_1 και βήμα δ
2. Υπολογίζουμε την $f(x_1)$.
3. Παίρνουμε ένα δεύτερο σημείο $x_2 = x_1 + \delta$ και υπολογίζουμε την $f(x_2)$.
4. Επαναλαμβάνουμε για $k = 3,4,\cdots$
   a. Διπλασιάζουμε το βήμα $\delta \leftarrow 2\delta$
   b. Παίρνουμε ένα νέο σημείο $x_k = x_{k-1} + \delta$
   c. Ελέγχουμε αν τα σημεία $[x_{k-2}, x_k], x_{k-1}$ αποτελούν διάστημα αβεβαιότητας.

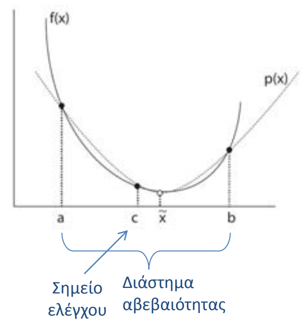


Τι γίνεται αν $f(x_2) > f(x_1)$;

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή

Η βασική ιδέα

Αφού ξέρουμε τις τιμές της συνάρτησης σε τρία σημεία a, b, c μπορούμε να προσεγγίσουμε τη συνάρτηση $f(x)$ με μια παραβολή που διέρχεται από τα τρία αυτά σημεία.



Η παραβολή έχει εξίσωση:

$$p(x) = Ax^2 + Bx + C$$

όπου τα A, B, C πρέπει να προσδιοριστούν

Το ελάχιστο της παραβολής είναι:

$$\tilde{x} = -\frac{B}{2A}$$

Οι άγνωστοι συντελεστές προσδιορίζονται από:

$$\left.\begin{aligned} f(a) &= Aa^2 + Ba + C \\ f(b) &= Ab^2 + Bb + C \\ f(c) &= Ac^2 + Bc + C \end{aligned}\right\}$$

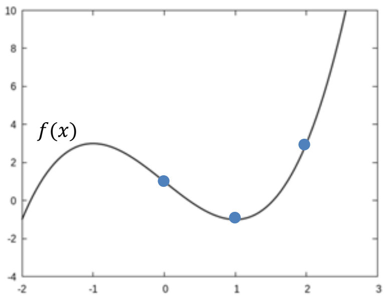
Γραμμικό σύστημα τριών εξισώσεων με τρεις αγνώστους

Παράδειγμα

Δίνεται η συνάρτηση

$$f(x) = x^3 - 3x + 1$$

a. Βρείτε την παραβολή που διέρχεται από τα σημεία $x_1 = 0,\ \ x_2 = 1,\ \ x_3 = 2$
b. Ποιο είναι το ελάχιστο της παραβολής;



Η παραβολή έχει εξίσωση:

$$p(x) = Ax^2 + Bx + C$$

Την εφαρμόζουμε στα τρία σημεία:

$$Ax_1^2 + Bx_1 + C = f(x_1)$$
$$Ax_2^2 + Bx_2 + C = f(x_2)$$
$$Ax_3^2 + Bx_3 + C = f(x_3)$$

Προκύπτει το γραμμικό σύστημα εξισώσεων:

$$C = 1$$
$$A + B + C = -1$$
$$4A + 2B + C = 3$$

Παράδειγμα

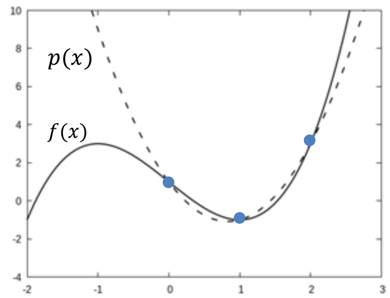
$$C = 1$$
$$A + B + C = -1$$
$$4A + 2B + C = 3$$

$$A + B = -2$$
$$4A + 2B = 2$$

$$A = 3$$
$$B = -5$$

Συνεπώς η παραβολή είναι:

$$p(x) = 3x^2 - 5x + 1$$



Για να βρούμε το ελάχιστο:

$$p'(x) = 6x - 5 = 0 \ \Rightarrow\ x = \frac{5}{6}$$

Επίσης:

$$p''(x) = 6 > 0 \ \Rightarrow\ \text{ελάχιστο}$$

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή

Λύνοντας το σύστημα λαμβάνουμε τους συντελεστές A, B, C.

Το ελάχιστο της παραβολής είναι:

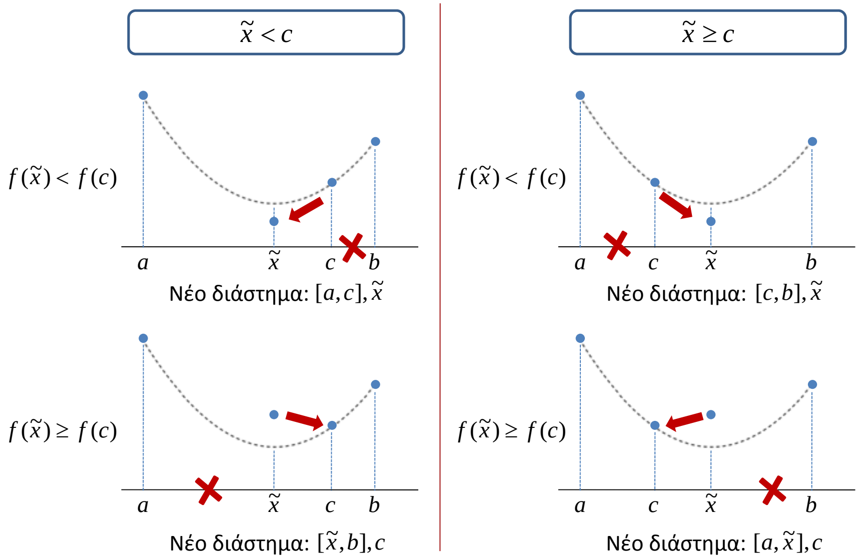
$$\tilde{x} = \frac{1}{2}\,\frac{\alpha^2(f_b - f_c) + b^2(f_c - f_a) + c^2(f_a - f_b)}{a(f_b - f_c) + b(f_c - f_a) + c(f_a - f_b)}$$

όπου συμβολίζουμε:

$$f_a = f(a) \qquad f_b = f(b) \qquad f_c = f(c)$$

Στη συνέχεια ανάλογα με τη θέση του ελαχίστου απορρίπτουμε ένα τμήμα του διαστήματος αβεβαιότητας.

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή



Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή

Αλγόριθμος

1. Δίνονται ως είσοδος το αρχικό διάστημα αβεβαιότητας $[a, b], c$
2. Έλεγχος αν ικανοποιούνται τα κριτήρια τερματισμού
3. Υπολογίζουμε το ελάχιστο της παραβολής $\tilde{x}$ και το $\tilde{f} = f(\tilde{x})$
4. Έλεγχος της θέσης του $\tilde{x}$ σε σχέση με το c
    a. Εάν $\tilde{x} < c$
        - Εάν $\tilde{f} < f(c)$ τότε το νέο διάστημα είναι: $[a, c], \tilde{x}$
        - Εάν $\tilde{f} \geq f(c)$ τότε το νέο διάστημα είναι: $[\tilde{x}, b], c$

    b. Εάν $\tilde{x} \geq c$
        - Εάν $\tilde{f} < f(c)$ τότε το νέο διάστημα είναι: $[a, c], \tilde{x}$
        - Εάν $\tilde{f} \geq f(c)$ τότε το νέο διάστημα είναι: $[\tilde{x}, b], c$
5. Επαναλαμβάνουμε από το βήμα 2.

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή

Κριτήρια τερματισμού

Εφαρμόζονται κατά περίπτωση ένα ή περισσότερα κριτήρια τερματισμού της διαδικασίας.

1. Αν το μέγεθος του διαστήματος αβεβαιότητας γίνει μικρότερο από ένα προκαθορισμένο όριο
$$b - a < 2\varepsilon_x$$
2. Η σχετική μείωση της τιμής της συνάρτησης είναι μικρότερη από ένα προκαθορισμένο όριο
$$\left|\frac{f_c^{(k)} - f_c^{(k+1)}}{f_c^{(k)}}\right| < \varepsilon_f$$
3. Ο συνολικός αριθμός κλήσεων της συνάρτησης ξεπερνά ένα προκαθορισμένο όριο n_{max}

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Τετραγωνική παρεμβολή

Πόσες επαναλήψεις χρειάζονται ;

- Το πλήθος των επαναλήψεων που απαιτούνται για να πετύχουμε μια προκαθορισμένη ακρίβεια:
    - Εξαρτάται από τη μορφολογία της συνάρτησης
    - Δεν μπορεί να προσδιοριστεί εκ των προτέρων
- Σύκριση με τις προηγούμενες μεθόδους μείωσης του διαστήματος αβεβαιότητας είναι εφικτή μόνο αφού ολοκληρωθεί ο αλγόριθμος.

Μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: Κυβική παρεμβολή

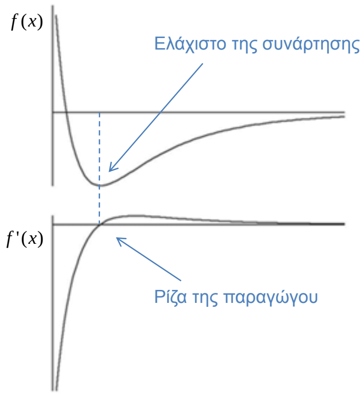
Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε πολυώνυμο υψηλότερης τάξης, πχ κυβικό
$$p(x) = Ax^3 + Bx^2 + Cx + D$$

Μέθοδοι που βασίζονται στην εύρεση ριζών

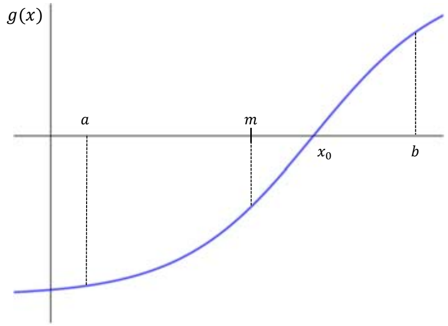
Βασίζονται στη παρατήρηση ότι για να βρούμε το ελάχιστο x^* πρέπει να λύσουμε τη μη γραμμική εξίσωση $f'(x) = 0$

Μπορούμε να εφαρμόσουμε αλγορίθμους για εύρεση ρίζας της $g(x) = f'(x)$

- Μέθοδος διχοτόμησης
- Μέθοδος ψευδούς σημείου (Regula falsi)
- Μέθοδος Newton
- Μέθοδος τέμνουσας (secant)



Εύρεση ριζών με διχοτόμηση



Βασίζεται στο θεώρημα Bolzano:
Αν μια συνάρτηση $g(x)$ είναι συνεχής σε διάστημα $[a, b]$ και ισχύει $g(a)g(b) < 0$ τότε υπάρχει τουλάχιστον ένα σημείο $x_0 \in (a, b)$ τέτοιο ώστε $g(x_0) = 0$

Εύρεση ριζών με διχοτόμηση

Αλγόριθμος

1. Δίνεται αρχικό διάστημα τέτοιο ώστε $g(a)g(b) < 0$
2. Έλεγχος κριτηρίων τερματισμού
3. Χωρίζουμε το διάστημα σε δύο ίσα μέρη $m = \frac{a+b}{2}$
4. Υπολογίζουμε την τιμή $g(m)$
5. Έλεγχος
   a. Εάν $g(a)g(m) < 0$ το νέο διάστημα είναι $[a, m]$
   b. Εάν $g(m)g(b) < 0$ το νέο διάστημα είναι $[m, b]$
6. Επαναλαμβάνουμε από το βήμα 2

Κριτήρια τερματισμού

Το σφάλμα $\sigma = \frac{b-a}{2}$ είναι μικρότερο από μια προκαθορισμένη τιμή

Α αριθμός των επαναλήψεων υπερβαίνει ένα προκαθορισμένο μέγιστο n_{max}

Εύρεση ριζών με διχοτόμηση

Πλήθος επαναλήψεων

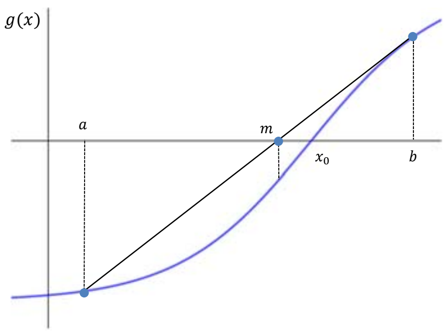
Σε κάθε επανάληψη το μήκος του διαστήματος μειώνεται στο μισό συνεπώς μετά από k επαναλήψεις το μήκος είναι $\frac{b-a}{2^k}$

$$\text{σφάλμα} = \frac{\text{μήκος τελικού διαστήματος}}{2} = \frac{1}{2}\frac{b-a}{2^k}$$

Μπορούμε να προκαθορίσουμε το πλήθος των επαναλήψεων αν ορίσουμε το ανεκτό σφάλμα σ στην εύρεση της ρίζας.

$$\sigma = \frac{1}{2}\frac{b-a}{2^k} \Rightarrow \quad 2^k = \frac{b-a}{2\sigma} \Rightarrow \quad \boxed{k = \frac{\log \frac{b-a}{2\sigma}}{\log 2}}$$

Μέθοδος ψευδούς σημείου – Regula falsi



Φέρνουμε την ευθεία μεταξύ των σημείων $(\alpha, g(a))$ και $(b, g(b))$

$$y = g(a) + (x - a)\frac{g(b) - g(a)}{b - a}$$

Χρησιμοποιούμε το σημείο m όπου η ευθεία τέμνει τον άξονα x

$$m = \frac{ag(b) - bg(a)}{g(b) - g(a)}$$

Το σημείο m χωρίζει το διάστημα δύο άνισα διαστήματα.

Το πλήθος επαναλήψεων δεν μπορεί να προϋπολογιστεί.

Μέθοδος ψευδούς σημείου – Regula Falsi

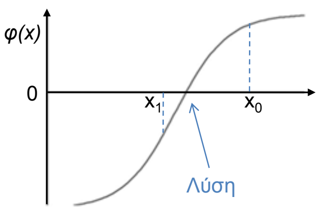
Αλγόριθμος

1. Δίνεται αρχικό διάστημα τέτοιο ώστε $g(a)g(b) < 0$
2. Έλεγχος κριτηρίων τερματισμού.
3. Φέρνουμε την ευθεία μεταξύ των σημείων $(\alpha, g(a))$ και $(b, g(b))$ και βρίσκουμε το σημείο τομής με τον άξονα x
$$m = \frac{ag(b) - bg(a)}{g(b) - g(a)}$$
4. Υπολογίζουμε την τιμή $g(m)$
5. Έλεγχος
    a. Εάν $g(a)g(m) < 0$ το νέο διάστημα είναι $[a, m]$
    b. Εάν $g(m)g(b) < 0$ το νέο διάστημα είναι $[m, b]$
6. Επαναλαμβάνουμε από το βήμα 2

Η μέθοδος Newton για εύρεση ριζών εξίσωσης

Θέλουμε να λύσουμε τη μη γραμμική εξίσωση

$$\varphi(x) = 0$$

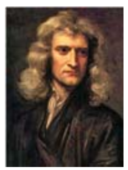


Η βασική ιδέα:

Ξεκινάμε με μια αρχική προσέγγιση της λύσης x_0

Κατόπιν βρίσκουμε ένα βήμα h τέτοιο ώστε το σημείο $x_0 + h$ να είναι η λύση, δηλαδή:

$$\varphi(x_0 + h) = 0$$



Sir Isaac Newton 1642-1726

Ανάπτυγμα σε σειρά Taylor

Ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης $f(x)$ γύρω από το σημείο a

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(a) + \frac{(x - a)^2}{2}f''(a) + \frac{(x - a)^3}{3!}f'''(a) + \cdots + \frac{(x - a)^m}{m!}f^{(m)}(a)$$

ή αλλιώς

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x - a)^k}{k!} f^{(k)}(a)$$

Ανάπτυγμα της συνάρτησης $f(x)$ σε απόσταση h από το σημείο x

Προκύπτει αν θέσουμε στο παραπάνω όπου a το x και όπου x το $x + h$

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \cdots + \frac{h^m}{m!}f^{(m)}(x)$$

ή αλλιώς

$$f(x + h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x)$$

Η μέθοδος Newton για εύρεση ριζών εξίσωσης

Γράφουμε τη σειρά Taylor της $\varphi(x)$ κρατώντας μόνο τον όρο πρώτης τάξης

$$\boxed{\varphi(x) = \varphi(a) + (x-a)\varphi'(a)} + \frac{(x-a)^2}{2}\varphi''(a) + \cdots$$

Θέλουμε να βρούμε το σημείο όπου

$\varphi(x) = 0$

Αντικαθιστούμε από τη σειρά Taylor:

$$\varphi(a) + (x-a)\varphi'(a) = 0 \;\Rightarrow$$

$$x = a - \frac{\varphi(a)}{\varphi'(a)}$$

$$\boxed{h = -\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}}$$

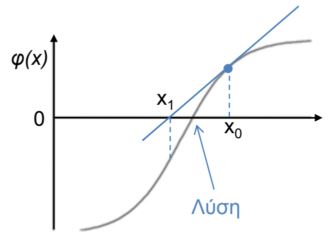
Βήμα Newton για επίλυση εξισώσεων

Η μέθοδος Newton για εύρεση ριζών εξίσωσης

Γεωμετρική ερμηνεία

Προσεγγίζουμε τη συνάρτηση με ευθεία στο σημείο x_0

Βρίσκουμε το σημείο τομής της ευθείας με τον άξονα x



Η μέθοδος Newton για εύρεση ριζών εξίσωσης

Αλγόριθμος:

1. Δίνεται η συνάρτηση $\varphi(x)$ και αρχικό σημείο x_0
2. Επαναλαμβάνουμε για $k = 1,2,\cdots$
   a. Ελέγχουμε τα κριτήρια τερματισμού
   b. Υπολογίζουμε το βήμα Newton: $h = -\varphi(x_k)/\varphi'(x_k)$
   c. Βρίσκουμε το νέο σημείο: $x_{k+1} = x_k + h$

Συνήθη κριτήρια τερματισμού:

- $|\varphi(x_k)| < \varepsilon$
- Το πλήθος των επαναλήψεων ξεπερνάει ένα προκαθορισμένο αριθμό n_{max}

Η μέθοδος Newton για ελαχιστοποίηση

Εάν θέλουμε να βρούμε ελάχιστο της συνάρτησης $f(x)$ εφαρμόζουμε τη μέθοδο Newton για να λύσουμε τη μη γραμμική εξίσωση:

$$f'(x) = 0$$

Γράφουμε το ανάπτυγμα Taylor της $f'(x)$ κρατώντας μόνο τον όρο πρώτης τάξης:

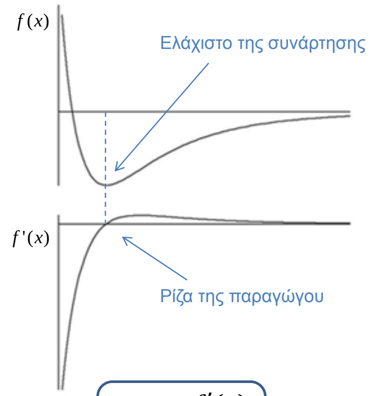
$$f'(x) = f'(a) + (x-a)f''(a)$$

Θέλουμε η $f'(x)$ να μηδενίζεται

$$f'(x) = 0 \;\Rightarrow$$

$$f'(a) + (x-a)f''(a) = 0 \;\Rightarrow$$

$$x = a - \frac{f'(a)}{f''(a)}$$



$$\boxed{h = -\frac{f'(x)}{f''(x)}}$$

Βήμα Newton για ελαχιστοποίηση

Η μέθοδος Newton για ελαχιστοποίηση

Αλγόριθμος:

1. Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$ και αρχικό σημείο x_0
2. Επαναλαμβάνουμε για $k = 1,2,\cdots$
   a. Ελέγχουμε τα κριτήρια τερματισμού
   b. Υπολογίζουμε το βήμα Newton: $h = -f'(x_k)/f''(x_k)$
   c. Βρίσκουμε το νέο σημείο: $x_{k+1} = x_k + h$

Συνήθη κριτήρια τερματισμού:

- $|f'(x_k)| < \varepsilon$
- Το πλήθος των επαναλήψεων ξεπερνάει ένα προκαθορισμένο αριθμό n_{max}

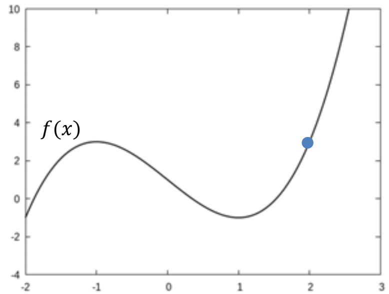
Παράδειγμα

Δίνεται η συνάρτηση

$$f(x) = x^3 - 3x + 1$$

και το αρχικό σημείο $x_0 = 2$.

a. Ποιο είναι το βήμα Newton της πρώτης επανάληψης;
b. Ποιο είναι το νέο σημείο που προκύπτει;



Το βήμα Newton είναι

$$h = -f'(x)/f''(x)$$

Χρειαζόμαστε την $f'(x)$ και $f''(x)$

$$f'(x) = 3x^2 - 3$$

$$f''(x) = 6x$$

Συνεπώς το βήμα Newton είναι:

$$h = -\frac{f'(x)}{f''(x)} = -\frac{3x^2 - 3}{6x}$$

Αντικαθιστούμε το αρχικό σημείο

$$h = -\frac{3 \times 2^2 - 3}{6 \times 2} \Rightarrow$$

$$h = -\frac{3}{4}$$

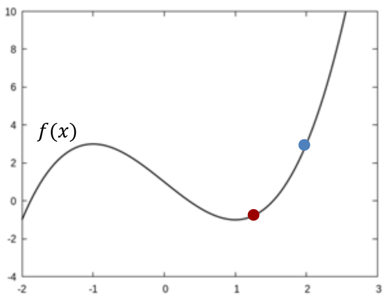
Παράδειγμα

Το νέο σημείο είναι:

$$x_1 = x_0 + h \Rightarrow$$

$$x_1 = 2 - \frac{3}{4} \Rightarrow$$

$$x_1 = \frac{5}{4}$$



Η μέθοδος Newton για ελαχιστοποίηση

Πλεονεκτήματα:

- Εξαιρετικά γρήγορη σύγκλιση αν το αρχικό σημείο x_0 είναι κοντά στο ελάχιστο.

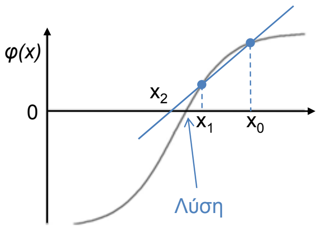
Μειονεκτήματα:

- Δεν χρησιμοποιεί διάστημα αβεβαιότητας.
- Απαιτείται υπολογισμός των πρώτων και δεύτερων παραγώγων.
- Η δεύτερη παράγωγος μπορεί να μην είναι θετική → οδηγούμαστε σε μέγιστο.
- Μπορεί να μην συγκλίνει για αρχικά σημεία x_0 μακριά από το ελάχιστο.

Μέθοδος τέμνουσας για ρίζες εξίσωσης

Στη μέθοδο Newton για ρίζες εξίσωσης δημιουργούμε μια σειρά σημείων

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



Μπορούμε να προσεγγίσουμε την παράγωγο από δύο διαδοχικά σημεία (τύπος εμπρόσθιας διαφοράς)

$$\varphi'(x) = \frac{\varphi(x_k) - \varphi(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

Συνεπώς

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

Με τον τρόπο αυτό αποφεύγουμε τον υπολογισμό της πρώτης παραγώγου
Όμως για να βρούμε το επόμενο σημείο x_{k+1} χρειαζόμαστε τα δύο προηγούμενα σημεία: x_k και x_{k-1}

Μέθοδος τέμνουσας για ρίζες εξίσωσης

Αλγόριθμος:

1. Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$ και δύο αρχικά σημεία x_0, x_1
2. Επαναλαμβάνουμε για $k = 2,3,\cdots$
   a. Ελέγχουμε τα κριτήρια τερματισμού
   b. Βρίσκουμε το νέο σημείο: $x_{k+1} = x_k - \varphi(x_k)\frac{x_k - x_{k-1}}{\varphi(x_k) - \varphi(x_{k-1})}$

Μέθοδος τέμνουσας για ελαχιστοποίηση

Στη μέθοδο Newton ελαχιστοποίηση δημιουργούμε μια σειρά σημείων

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

Μπορούμε να προσεγγίσουμε την δεύτερη παράγωγο από δύο διαδοχικά σημεία (τύπος εμπρόσθιας διαφοράς)

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

Συνεπώς

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

Με τον τρόπο αυτό αποφεύγουμε τον υπολογισμό της δεύτερης παραγώγου
Όμως για να βρούμε το επόμενο σημείο x_{k+1} χρειαζόμαστε τα δύο προηγούμενα σημεία: x_k και x_{k-1}

Μέθοδος τέμνουσας για ελαχιστοποίηση

Αλγόριθμος:

1. Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$ και δύο αρχικά σημεία x_0, x_1
2. Επαναλαμβάνουμε για $k = 2,3,\cdots$
   a. Ελέγχουμε τα κριτήρια τερματισμού
   b. Βρίσκουμε το νέο σημείο: $x_{k+1} = x_k - f'(x_k)\frac{x_k - x_{k-1}}{f'(x_k) - f'(x_{k-1})}$