

# Μέθοδοι πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης χωρίς παραγώγους

Δ. Γ. Παπαγεωργίου  
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

dparageo@cc.uoi.gr  
http://pc164.materials.uoi.gr/dparageo

## Μέθοδοι ελαχιστοποίησης πολυδιάστατων συναρτήσεων

### Μέθοδοι χωρίς παραγώγους

Ενδεικτικά:

- Μη γραμμική μέθοδος Simplex
- Πολυκατευθυντική αναζήτηση (MDS)
- Αναζήτηση προτύπου

Πλεονεκτήματα:

- Χρησιμοποιούνται μόνο τιμές της συνάρτησης, όχι των παραγώγων.
- Μπορούν να εφαρμοστούν σε ασυνεχείς συναρτήσεις ή συναρτήσεις με θόρυβο.

Μειονεκτήματα:

- Χαμηλή απόδοση όταν έχουμε πολλές μεταβλητές, τυπικά  $n > 10$

### Μέθοδοι με παραγώγους

Ενδεικτικά:

- Μέθοδος της πιο απότομης καθόδου
- Μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων
- Μέθοδος Newton
- Μέθοδος Gauss-Newton
- Μέθοδοι Quasi-Newton

Πλεονεκτήματα:

- Πιο αποδοτικές από μεθόδους χωρίς παραγώγους.
- Υπάρχουν θεωρητικές αποδείξεις σύγκλισης.

Μειονεκτήματα:

- Απαιτούνται οι παράγωγοι της συνάρτησης.
- Δυσκολία εφαρμογής σε μη συνεχείς συναρτήσεις.

## Μέθοδος Simplex

Simplex ονομάζουμε την κυρτή θήκη που σχηματίζεται από  $N + 1$  σημεία στον  $N$ -διάστατο χώρο.

1. Επιλέγουμε  $N + 1$  σημεία.

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_{N+1}$$

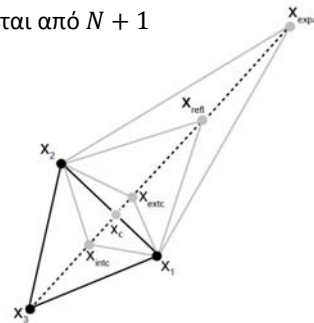
2. Υπολογίζουμε τις τιμές της συνάρτησης στα σημεία αυτά και τα αναδιατάσσουμε έτσι ώστε:

$$f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_2) \leq \dots \leq f(\mathbf{x}_N) \leq f(\mathbf{x}_{N+1})$$

Καλύτερο σημείο

Δεύτερο χειρότερο σημείο

Χειρότερο σημείο



Η βασική ιδέα

Να αντικαταστήσουμε το χειρότερο σημείο με ένα που έχει μικρότερη τιμή συνάρτησης

## Μέθοδος Simplex

3. Επανάληψη για  $k = 1, 2, \dots$

a. Υπολογίζουμε το κέντρο του Simplex:

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i$$

b. Κατοπτρισμός του χειρότερου σημείου διαμέσου του κέντρου:

$$\mathbf{x}_{refl} = \mathbf{x}_c + \alpha(\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_{N+1})$$

c. Εξετάζουμε τις παρακάτω περιπτώσεις:

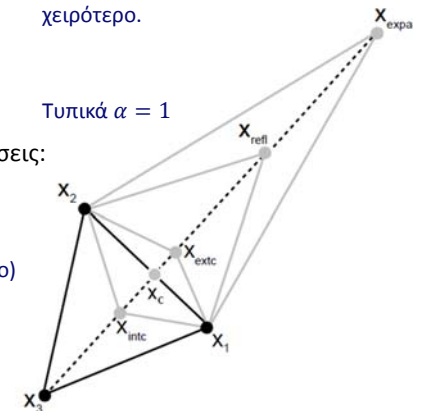
I.  $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_{refl}) \leq f(\mathbf{x}_N)$

II.  $f(\mathbf{x}_{refl}) \leq f(\mathbf{x}_1)$   
(Βρήκαμε ένα νέο καλύτερο σημείο)

III.  $f(\mathbf{x}_N) < f(\mathbf{x}_{refl})$   
(Βρήκαμε ένα νέο χειρότερο σημείο)

Μέση τιμή όλων των σημείων εκτός από το χειρότερο.

Τυπικά  $\alpha = 1$



## Μέθοδος Simplex

$$I. f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_{refl}) \leq f(\mathbf{x}_N)$$



Το  $\mathbf{x}_{refl}$  γίνεται αποδεκτό ως νέο σημείο του simplex και το  $\mathbf{x}_{N+1}$  απορρίπτεται.

$$II. f(\mathbf{x}_{refl}) \leq f(\mathbf{x}_1)$$



Ευκαιρία να κινηθούμε σε ακόμη χαμηλότερες τιμές της συνάρτησης.

Εφαρμόζουμε επέκταση:

$$\mathbf{x}_{expa} = \mathbf{x}_c + \gamma(\mathbf{x}_{refl} - \mathbf{x}_c) \quad \text{Τυπικά } \gamma = 2$$

Αν  $f(\mathbf{x}_{expa}) \leq f(\mathbf{x}_{refl})$  τότε δεχόμαστε το  $\mathbf{x}_{expa}$  αλλιώς δεχόμαστε το  $\mathbf{x}_{refl}$

Το  $\mathbf{x}_{N+1}$  απορρίπτεται.

## Μέθοδος Simplex

$$III. f(\mathbf{x}_N) < f(\mathbf{x}_{refl})$$



Εφαρμόζουμε συστολή

$$\mathbf{x}_{contr} = \begin{cases} \mathbf{x}_{extc} = \mathbf{x}_c + \beta(\mathbf{x}_{refl} - \mathbf{x}_c) & \text{αν } f(\mathbf{x}_N) < f(\mathbf{x}_{refl}) < f(\mathbf{x}_{N+1}) \\ \mathbf{x}_{intc} = \mathbf{x}_c + \beta(\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{x}_c) & \text{αν } f(\mathbf{x}_{N+1}) \leq f(\mathbf{x}_{refl}) \end{cases}$$

Εξωτερική συστολή  
Εσωτερική συστολή

Τυπικά  $\beta = 0.5$

Αν  $f(\mathbf{x}_{contr}) < f(\mathbf{x}_{refl})$  και  $f(\mathbf{x}_{contr}) < f(\mathbf{x}_{N+1})$  τότε κρατάμε το  $\mathbf{x}_{contr}$

αλλιώς

εφαρμόζουμε σμίκρυνση όλου του simplex

$$\mathbf{x}_i = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_1) \quad \text{για } i = 2, \dots, N+1$$

## Μέθοδος Simplex

### Κριτήρια τερματισμού

$$f(\mathbf{x}_{N+1}) - f(\mathbf{x}_1) < \varepsilon$$

$$\frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^{N+1} |f(\mathbf{x}_i) - \bar{f}| < \varepsilon$$

όπου

$$\bar{f} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^{N+1} f(\mathbf{x}_i)$$