

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

Σημειώσεις για το μάθημα
“Υπολογιστικές μέθοδοι πολύπλοκων συστημάτων”

Δ. Γ. Παπαγεωργίου

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2016

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	5
1.1	Ιστορική αναδρομή	5
1.2	Συμβολισμοί	6
1.2.1	Τυπογραφικές συμβάσεις	6
1.2.2	Σύμβολα	6
1.3	Περιγραφή του προβλήματος	7
1.4	Συνθήκες για την ύπαρξη του ελαχίστου	8
2	Μέθοδοι μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης	11
2.1	Αναζήτηση με διαμέριση	11
2.2	Τεχνικές διαστημάτων αβεβαιότητας	11
2.2.1	Απόδοση μεθόδου	12
2.2.2	Αναζήτηση ίσων διαστημάτων	13
2.2.3	Αναζήτηση διχοτόμησης	13
2.2.4	Αναζήτηση Fibonacci	14
2.2.5	Αναζήτηση χρυσής τομής	16
2.3	Διχοτόμηση με χρήση της παραγώγου	17
2.4	Τεχνικές προσέγγισης της συνάρτησης	18
2.4.1	Τετραγωνική παρεμβολή	18
2.4.2	Κριτήρια τερματισμού	19
3	Μέθοδοι πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης χωρίς παραγώγους	21
3.1	Μέθοδος Simplex	21
4	Μέθοδοι πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης με παραγώγους	25
4.1	Βασικές έννοιες	25
4.2	Τετραγωνικό μοντέλο μονοδιάστατης συνάρτησης	25
4.3	Παραβολή σε πολλές διαστάσεις	26
4.4	Τετραγωνικό μοντέλο πολυδιάστατης συνάρτησης	27
4.5	Η βασική δομή μιας μεθόδου	27
4.6	Φθίνουσες διευθύνσεις	28
4.7	Η διεύθυνση της πιο απότομης καθόδου	28
4.8	Γραμμική αναζήτηση	28
4.8.1	Γραμμική αναζήτηση με χρήση παραγώγων	29
4.9	Η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου	30
4.10	Η μέθοδος Newton	31
4.11	Μέθοδοι quasi-Newton	32
4.12	Μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων	34
4.13	Μέθοδοι διαστημάτων εμπιστοσύνης	35
4.14	Αθροίσματα τετραγώνων – Μη γραμμικές εξισώσεις	35
4.14.1	Μέθοδος Gauss-Newton	36
5	Αριθμητική προσέγγιση παραγώγων	37

5.1	Εισαγωγή	37
5.2	Σειρά Taylor	38
5.3	Τύποι εμπρόσθιας/οπίσθιας διαφοράς	38
5.3.1	Σφάλμα αποκοπής στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς	38
5.3.2	Σφάλμα λόγω πεπερασμένης ακρίβειας στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς	39
5.3.3	Επιλογή του κατάλληλου βήματος	39
5.4	Κεντρικές διαφορές	40
5.5	Τύποι μεγαλύτερης ακρίβειας	41
5.6	Επέκταση στο όριο του Richardson	42
5.7	Δεύτερες παράγωγοι	42
	Βιβλιογραφία	42

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Ιστορική αναδρομή

Η ελαχιστοποίηση μιας πολυδιάστατης συνάρτησης απαντάται σε πολλούς επιστημονικούς και τεχνολογικούς τομείς όπου πλήθος προβλημάτων συχνά ανάγονται στην επίλυση ενός προβλήματος ελαχιστοποίησης. Οι δυσκολίες της πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης είναι πολλές και ποικίλες. Είναι γνωστό ότι δεν υπάρχει μέθοδος που να αντιμετωπίζει ικανοποιητικά όλα τα προβλήματα. Η συνάρτηση μπορεί να μην έχει γνωστή αναλυτική μορφή, οπότε οι παράγωγοί της πρέπει να εκτιμηθούν αριθμητικά, πράγμα που κοστίζει σε χρόνο υπολογισμού και ακρίβεια. Στην περίπτωση που ταυτόχρονα απαιτείται να ικανοποιούνται γνωστές συνθήκες μεταξύ των μεταβλητών το πρόβλημα αποκτά περιορισμούς και βέβαια γίνεται πιο δύσκολο.

Πριν από το 1940 λίγα ήταν γνωστά για μεθόδους αριθμητικής βελτιστοποίησης πολυδιάστατων συναρτήσεων. Η μέθοδος Newton ήταν ήδη γνωστή, όμως οποιοδήποτε πρόβλημα ακόμη και μικρής πολυπλοκότητας απαιτούσε τεράστια προσπάθεια για την επίλυσή του. Η κατασκευή των πρώτων ηλεκτρονικών υπολογιστών στα μέσα της δεκαετίας του 1940, και η ραγδαία μετέπειτα εξέλιξή τους, αποτέλεσε σταθμό στην ανάπτυξη της επιστήμης της βελτιστοποίησης.

Η δεκαετία του 1950 είδε την ανάπτυξη ενός σημαντικού κλάδου γνωστού ως *γραμμικού προγραμματισμού*¹ και την κατασκευή αλγορίθμων ευρείας εφαρμογής, που δεν βασίζονταν στην δομή κάθε συγκεκριμένου προβλήματος. Οι μέθοδοι αυτές ήταν αρχικά χονδροειδείς και ελάχιστα αποτελεσματικές, όμως το θέμα επανήλθε με την πρωτοποριακή δουλειά του W. C. Davidson που οδήγησε στην ανάπτυξη των μεθόδων μεταβλητής μετρικής.

Από τότε η εξέλιξη του αντικειμένου ήταν ραγδαία. Βοηθούμενη από τις συνεχώς αυξανόμενες δυνατότητες των ηλεκτρονικών υπολογιστών, η έρευνα στον τομέα της βελτιστοποίησης ανέπτυξε πλήθος μεθόδων για την αντιμετώπιση προβλημάτων κάθε κατηγορίας. Βελτιστοποίηση κάτω από μη γραμμικούς περιορισμούς, βελτιστοποίηση μεγάλης κλίμακας και εύρεση καθολικού ελαχίστου σε συνδυασμό με την κατασκευή του απαραίτητου λογισμικού αποτελούν τρέχοντα ερευνητικά θέματα.

Για μια πλήρη παρουσίαση μεθόδων ελαχιστοποίησης καθώς και θεωρητικά αποτελέσματα ο αναγνώστης παραπέμπεται στη βιβλιογραφία [1, 2, 3, 4, 5, 6].

¹Ο όρος προγραμματισμός είναι συνώνυμος με τον όρο βελτιστοποίηση, και αρχικά χρησιμοποιούνταν με την έννοια της βέλτιστης σχεδίασης (προγραμματισμού).

1.2 Συμβολισμοί

1.2.1 Τυπογραφικές συμβάσεις

Μικρά έντονα γράμματα όπως \mathbf{x} , \mathbf{s} , κλπ., δηλώνουν διανύσματα ή μονοδιάστατους πίνακες-στήλη στο χώρο των N διαστάσεων. Τα επιμέρους στοιχεία τους αναφέρονται με τη χρήση ενός δείκτη, όπως x_i , s_i , κλπ. Πχ:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$$

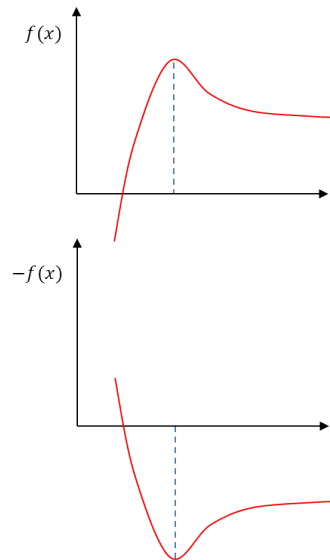
Κεφαλαία έντονα γράμματα όπως \mathbf{H} , \mathbf{G} , κλπ., δηλώνουν δισδιάστατους πίνακες $N \times N$. Τα επιμέρους στοιχεία τους αναφέρονται με τη χρήση δύο δεικτών, όπως H_{ij} , G_{ij} . Πχ:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1N} \\ G_{21} & G_{22} & \dots & G_{2N} \\ \vdots & & & \\ G_{N1} & G_{N2} & \dots & G_{NN} \end{pmatrix}$$

Ο εκθέτης T σε ένα διάνυσμα ή πίνακα (\mathbf{x}^T , \mathbf{G}^T κλπ.) δηλώνει τον ανάστροφο του διανύσματος ή του πίνακα. Ο εκθέτης -1 σε ένα πίνακα (πχ. \mathbf{G}^{-1}) δηλώνει τον αντίστροφο του. Μη αναλογική γραφή Courier χρησιμοποιείται για την ακριβή αναπαραγωγή δεδομένων και προγραμμαμάτων υπολογιστή.

1.2.2 Σύμβολα

$f(\mathbf{x})$	Η συνάρτηση προς ελαχιστοποίηση. Αναφέρεται ως η <i>αντικειμενική συνάρτηση</i> . Τα στοιχεία x_i είναι οι μεταβλητές ή παράμετροι της συνάρτησης.
N	Το πλήθος των μεταβλητών της αντικειμενικής συνάρτησης $f(\mathbf{x})$. Αναφέρεται και ως η <i>διάσταση</i> του προβλήματος.
$\nabla f(\mathbf{x})$ ή \mathbf{g}	Το διάνυσμα των πρώτων παραγώγων της συνάρτησης $f(\mathbf{x})$ με στοιχεία $g_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$
$\nabla^2 f(\mathbf{x})$ ή \mathbf{G}	Ο πίνακας των δεύτερων παραγώγων (ή Εσσιανός πίνακας) της συνάρτησης $f(\mathbf{x})$ με στοιχεία $G_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$
\mathbf{B}	Προσέγγιση του πίνακα των δευτέρων παραγώγων \mathbf{G} .
\mathbf{H}	Προσέγγιση του αντίστροφου πίνακα των δευτέρων παραγώγων \mathbf{G}^{-1} .
\mathbf{I}	Ο μοναδιαίος πίνακας $N \times N$.
$\hat{\mathbf{e}}_i$	Το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος της Καρτεσιανής διεύθυνσης i .
\mathbf{x}^*	Σημείο στο οποίο η $f(\mathbf{x})$ παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο.
f^* , \mathbf{g}^* , κλπ.	Οι τιμές των ποσοτήτων $f(\mathbf{x}^*)$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*)$ κλπ.
l_i, u_i	Κάτω και άνω όρια του πεδίου ορισμού της μεταβλητής x_i ($l_i \leq x_i \leq u_i$).
ε_m	Η σχετική ακρίβεια του υπολογιστή. Ο μικρότερος θετικός αριθμός τέτοιος ώστε $(1 + \varepsilon_m) \neq 1$ και $(1 - \varepsilon_m) \neq 1$



Σχήμα 1.1: Η αναγωγή ενός προβλήματος μεγιστοποίησης σε πρόβλημα ελαχιστοποίησης.

1.3 Περιγραφή του προβλήματος

Το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης συνήθως τίθεται ως:

$$\text{Εύρεση ελαχίστου της συνάρτησης } f(\mathbf{x}) : \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R} \quad (1.1)$$

Η $f(\mathbf{x})$ ονομάζεται *αντικειμενική συνάρτηση* και ένα σημείο στο οποίο παρουσιάζει ελάχιστο ονομάζεται *ελαχιστοποιητής* και συμβολίζεται με \mathbf{x}^* . Προβλήματα βελτιστοποίησης μπορούν να εκφραστούν ως προβλήματα μεγιστοποίησης μέσω του απλού μετασχηματισμού

$$\max\{f(\mathbf{x})\} = -\min\{-f(\mathbf{x})\}$$

Η διαδικασία απεικονίζεται στο σχήμα 1.1. Προβλήματα όπου η ζητούμενη λύση \mathbf{x}^* θα πρέπει επιπλέον να ικανοποιεί συγκεκριμένες συνθήκες αναφέρονται ως *προβλήματα ελαχιστοποίησης με περιορισμούς* και τίθενται ως:

$$\begin{aligned} &\text{Εύρεση ελαχίστου της συνάρτησης } f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^N \\ &\text{υπό τους περιορισμούς } \begin{cases} c_i(\mathbf{x}) = 0, & i = 1, 2, \dots, K \\ c_i(\mathbf{x}) \geq 0, & i = K + 1, \dots, M \end{cases} \end{aligned}$$

Συγκεκριμένα, μιλάμε για *ελαχιστοποίηση με γραμμικούς περιορισμούς* όταν οι συναρτήσεις $c_i(\mathbf{x})$ είναι γραμμικές, δηλαδή είναι της μορφής

$$c_i(\mathbf{x}) = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{iN}x_N \quad i = 1, 2, \dots, M$$

ή σε μορφή πίνακα

$$\mathbf{c} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

Εξαιρετικά κοινή και ιδιαίτερα χρήσιμη σε πληθώρα προβλημάτων είναι η περίπτωση όπου οι γραμμικοί περιορισμοί c_i τίθενται σε μορφή ορίων για τις μεταβλητές x_i .

$$l_i \leq x_i \leq u_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1.2)$$

Εάν οι συναρτήσεις c_i έχουν οποιαδήποτε άλλη μορφή, μιλάμε για *ελαχιστοποίηση με μη γραμμικούς περιορισμούς*. Τα προβλήματα με τα οποία θα ασχοληθούμε είναι της μορφής (1.1).



Σχήμα 1.2: Οι διαφορετικοί τύποι ελαχίστων.

Σε ορισμένες περιπτώσεις η αντικειμενική συνάρτηση έχει ειδική μορφή, πράγμα που επιτρέπει την κατασκευή αλγορίθμων ελαχιστοποίησης που την εκμεταλλεύονται. Μια συνηθισμένη περίπτωση είναι όταν η $f(x)$ μπορεί να εκφραστεί ως άθροισμα τετραγώνων άλλων συναρτήσεων

$$f(x) = \sum_{i=1}^M r_i^2(x) \quad (1.3)$$

Η μορφή αυτή συναντάται σε προβλήματα προσαρμογής δεδομένων.

1.4 Συνθήκες για την ύπαρξη του ελαχίστου

Πριν ασχοληθούμε με την περιγραφή ορισμένων μεθόδων ελαχιστοποίησης, είναι απαραίτητο να εξετάσουμε τις συνθήκες οι οποίες χαρακτηρίζουν ένα ελάχιστο.

Ένα σημείο x^* για το οποίο ισχύει $f(x^*) \leq f(x)$ για κάθε σημείο $x \neq x^*$ στη γειτονιά του x^* , ονομάζεται *ασθενές τοπικό ελάχιστο*.

Ένα σημείο x^* για το οποίο ισχύει $f(x^*) < f(x)$ για κάθε σημείο $x \neq x^*$ στη γειτονιά του x^* , ονομάζεται *ισχυρό τοπικό ελάχιστο*.

Μια συνάρτηση μπορεί να έχει περισσότερα του ενός τοπικά ελάχιστα. Το τοπικό ελάχιστο που αντιστοιχεί στη μικρότερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης ονομάζεται *καθολικό* (ή γενικό ή απόλυτο) ελάχιστο και για το αντίστοιχο σημείο x^* ισχύει $f(x^*) < f(x)$ για κάθε x στο πεδίο ορισμού της συνάρτησης. Οι διαφορετικοί τύποι ελαχίστων φαίνονται στο σχήμα 1.2.

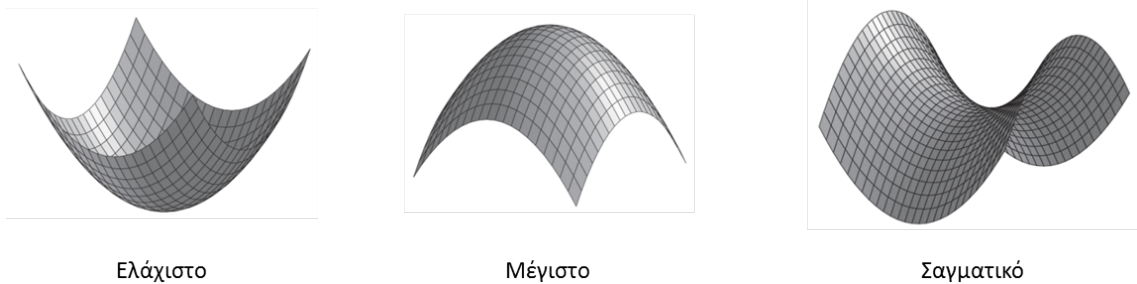
Αν υποθέσουμε ότι η $f(x)$ είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη τότε μπορεί να αποδειχθούν συνθήκες οι οποίες μπορούν να ελεγχθούν πιο εύκολα από τους ανωτέρω ορισμούς. Σε αυτή την περίπτωση για να παρουσιάζει η $f(x)$ ισχυρό τοπικό ελάχιστο στο σημείο x^* οι αναγκαίες και ικανές συνθήκες είναι:

– *Αναγκαίες συνθήκες:*

1. $\nabla f(x) = 0$
2. $s^T G^* s \geq 0 \quad \forall s$

– *Ικανές συνθήκες:*

1. $\nabla f(x) = 0$
2. $s^T G^* s > 0 \quad \forall s \neq 0$



Σχήμα 1.3: Οι διαφορετικοί τύποι στάσιμων σημείων για μια συνάρτηση δύο μεταβλητών.

Επειδή η συνθήκη $s^T G^* s > 0$ είναι δύσκολο να ελεγχθεί υπολογιστικά, στην πράξη χρησιμοποιείται η ισοδύναμη διατύπωση:

- Όλες οι ιδιοτιμές του G^* είναι θετικές.

Η συνθήκη $\nabla f(x) = 0$ από μόνη της δεν εξασφαλίζει την ύπαρξη ελαχίστου. Τα σημεία που την ικανοποιούν ονομάζονται *στάσιμα σημεία* και μπορούν να ταξινομηθούν περαιτέρω, εξετάζοντας τον Εσσιανό πίνακα. Αυτός μπορεί να είναι:

- Θετικά ορισμένος (όλες οι ιδιοτιμές του είναι θετικές). Τότε η $f(x)$ παρουσιάζει ελάχιστο στο σημείο x^* .
- Αρνητικά ορισμένος (όλες οι ιδιοτιμές του είναι αρνητικές). Τότε η $f(x)$ παρουσιάζει μέγιστο στο σημείο x^* .
- Έχει ιδιοτιμές αμφοτέρων προσήμων. Τότε το σημείο x^* λέγεται *σαγματικό σημείο*.
- Αόριστος. Έχει ιδιοτιμές αμφοτέρων προσήμων και μηδενικές ιδιοτιμές.

Οι διαφορετικοί τύποι στάσιμων σημείων φαίνονται στο σχήμα 1.3.

Κεφάλαιο 2

Μέθοδοι μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης

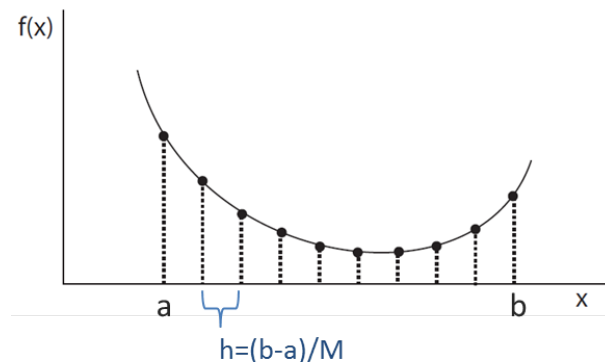
Η εύρεση του ελαχίστου συνάρτησης μιας μεταβλητής, είναι ένα σημαντικό υποπρόβλημα σε προβλήματα ελαχιστοποίησης υψηλότερων διαστάσεων. Οι μέθοδοι που παρουσιάζονται εδώ μπορούν να χωριστούν σε δύο κατηγορίες: αυτές που βασίζονται σε σύγκριση των τιμών της συνάρτησης μόνο, και σε αυτές που προσεγγίζουν την τιμή της συνάρτησης από κάποιο πολυώνυμο χαμηλού βαθμού.

2.1 Αναζήτηση με διαμέριση

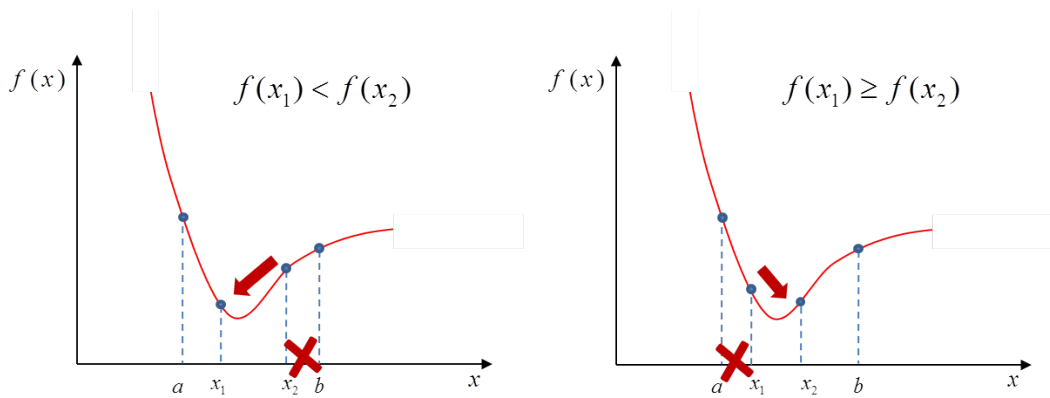
Ο απλούστερος τρόπος για να εντοπίσει κανείς ένα ελάχιστο είναι η αναζήτηση με διαμέριση. Το διάστημα $[a, b]$ στο οποίο αναζητούμε το ελάχιστο χωρίζεται σε M ίσα διαστήματα και υπολογίζεται η τιμή της συνάρτησης σε κάθε σημείο της διαμέρισης. Το σημείο με τη μικρότερη τιμή επιλέγεται ως το ελάχιστο. Σε σχέση με άλλες μεθόδους, η τεχνική αυτή είναι πολύ απλή και ιδιαίτερα εύρωστη. Αν $L = b - a$ είναι το μήκος του αρχικού διαστήματος, η ακρίβεια με την οποία εντοπίζεται το ελάχιστο είναι L/M μετά από $M + 1$ κλήσεις της συνάρτησης. Η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν η απαιτούμενη ακρίβεια δεν είναι ιδιαίτερα υψηλή, ενώ είναι απαγορευτική για προβλήματα υψηλότερων διαστάσεων. Η διαδικασία απεικονίζεται στο σχήμα 2.1.

2.2 Τεχνικές διαστημάτων αβεβαιότητας

Ένα διάστημα $[a, b]$ μέσα στο οποίο γνωρίζουμε ότι βρίσκεται ο ελαχιστοποιητής x^* ονομάζεται *διάστημα αβεβαιότητας*. Εάν το μήκος του διαστήματος είναι μικρό, τότε έχουμε μια καλή εκτίμηση για



Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση της αναζήτησης με διαμέριση.



Σχήμα 2.2: Αναπαράσταση της συρρίκνωσης του διαστήματος αβεβαιότητας.

τη θέση του ελαχίστου:

$$x^* = \frac{b+a}{2} \pm \frac{b-a}{2}$$

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν διαστήματα αβεβαιότητας, απαιτούν μόνο τον υπολογισμό τιμών της συνάρτησης οι οποίες συγκρίνονται μεταξύ τους, και στοχεύουν στη συρρίκνωση του διαστήματος αβεβαιότητας έτσι ώστε το ελάχιστο να εντοπιστεί με προκαθορισμένη ακρίβεια.

Το διάστημα αβεβαιότητας μπορεί να συρρικνωθεί ως εξής: 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 $f(x_1)$ και $f(x_2)$.

- Εάν $f(x_1) < f(x_2)$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[a, x_2]$.
- Εάν $f(x_1) > f(x_2)$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[x_1, b]$.
- Εάν $f(x_1) = f(x_2)$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[x_1, x_2]$.

Στην πράξη η τρίτη περίπτωση ($f(x_1) = f(x_2)$) ενσωματώνεται σε μια από τις δύο προηγούμενες. Η διαδικασία απεικονίζεται στο σχήμα 2.2.

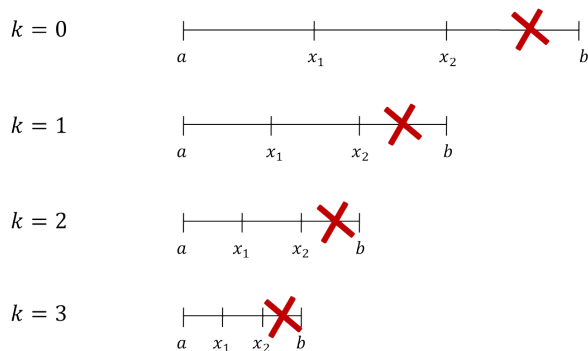
Οι διαφορετικές μέθοδοι που περιγράφονται στη συνέχεια προκύπτουν από διαφορετικές επιλογές για τα εσωτερικά σημεία x_1 και x_2 και υποθέτουν ότι η συνάρτηση $f(x)$ είναι μονότροπη (unimodal) στο διάστημα $[a, b]$. Μια συνάρτηση $f(x)$ $x \in [a, b]$ είναι μονότροπη εάν υπάρχει ένα μοναδικό σημείο $x^* \in [a, b]$ τέτοιο ώστε η $f(x)$ να είναι αυστηρά μονότονα αύξουσα, καθώς αυξάνει η απόσταση $|x - x^*|$ από το x^* .

2.2.1 Απόδοση μεθόδου

Η απόδοση μιας μεθόδου που χρησιμοποιεί διαστήματα αβεβαιότητας δίνεται από τον συντελεστή μείωσης $r(n)$, που ορίζεται ως ο λόγος

$$r(n) = \frac{d(n)}{d_0}$$

όπου $d(n)$ είναι το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας μετά από n κλήσεις της συνάρτησης (επιπλέον των δύο υπολογισμών στα άκρα του διαστήματος a και b που δεν μετρώνται), και d_0 είναι το μήκος του αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας. Όπως είναι φανερό, δεν υπάρχει ένας μοναδικός συντελεστής μείωσης, αλλά μια σειρά από τιμές $r(1), r(2), \dots, r(n)$.



Σχήμα 2.3: Αναπαράσταση της αναζήτησης ίσων διαστημάτων. Έχουμε υποθέσει ότι σε κάθε επανάληψη απορρίπτεται το δεξί διάστημα.

2.2.2 Αναζήτηση ίσων διαστημάτων

Χάριν απλότητας, και χωρίς βλάβη της γενικότητας ας υποθέσουμε ότι τα άκρα του αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας $[a, b]$ είναι $a = 0$ και $b = 1$. Τότε η πιο φυσική επιλογή των εσωτερικών σημείων x_1 και x_2 είναι $x_1 = \frac{1}{3}$ και $x_2 = \frac{2}{3}$. Έτσι μετά από τις δύο πρώτες κλήσεις της συνάρτησης το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας είναι $\frac{2}{3}$ και αντίστοιχα ο συντελεστής μείωσης $r(2) = \frac{2}{3}$. Αυτό οδηγεί στην παρακάτω ακολουθία:

$$\begin{array}{ll}
 k & r(k) \\
 2 & \frac{2}{3} \\
 4 & \left(\frac{2}{3}\right)^2 \\
 6 & \left(\frac{2}{3}\right)^3 \\
 \vdots & \vdots \\
 2m & \left(\frac{2}{3}\right)^m
 \end{array}$$

Θέτοντας $n = 2m$ βρίσκουμε για το συντελεστή απόδοσης:

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

Η διαδικασία απεικονίζεται στο σχήμα 2.3.

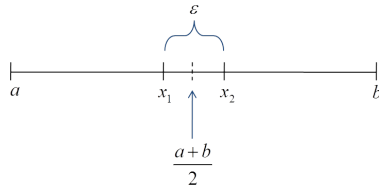
2.2.3 Αναζήτηση διχοτόμησης

Μια πιο αποδοτική τεχνική είναι γνωστή με το όνομα *αναζήτηση διχοτόμησης*. Αν ε είναι μια μικρή θετική ποσότητα η οποία μπορεί να είναι της τάξης της ακρίβειας της μηχανής, επιλέγουμε τα εσωτερικά σημεία ως:

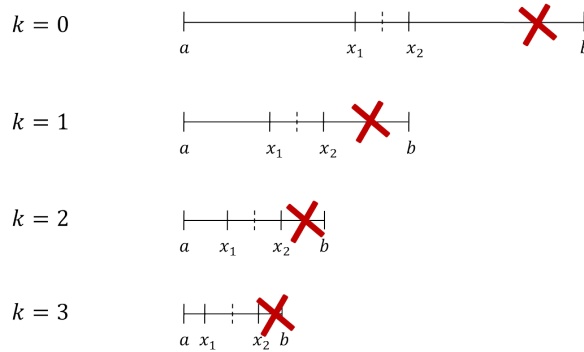
$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{2} \\
 x_2 &= \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2}
 \end{aligned}$$

δηλαδή προσπαθούμε να χωρίσουμε κατά το δυνατόν το διάστημα στη μέση. Ο τρόπος επιλογής των σημείων φαίνεται στο σχήμα 2.4. Ο συντελεστής μείωσης μετά από k κλήσεις της συνάρτησης είναι:

$$\begin{array}{ll}
 k & r(k) \\
 2 & \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2} \\
 4 & \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{2}\right) + \frac{\varepsilon}{2} = \frac{1}{4} + \frac{\varepsilon}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\right) \\
 \vdots & \vdots \\
 2m & \frac{1}{2^m} + \frac{\varepsilon}{2}\left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{2^{m-1}}\right) = \frac{1}{2^m} + \varepsilon\left(1 - \frac{1}{2^m}\right)
 \end{array}$$



Σχήμα 2.4: Η επιλογή των εσωτερικών σημείων στην αναζήτηση διχοτόμησης.



Σχήμα 2.5: Αναπαράσταση της αναζήτησης με διχοτόμηση. Έχουμε υποθέσει ότι σε κάθε επανάληψη απορρίπτεται το δεξί διάστημα.

Στην τελευταία γραμμή κάναμε χρήση της ταυτότητας

$$1 - x^m = (1 - x)(1 + x + x^2 + \dots + x^{m-1})$$

με $x = \frac{1}{2}$. Αν αγνοήσουμε τον όρο που είναι ανάλογος της μικρής ποσότητας ε , και θέτοντας $n = 2m$ βρίσκουμε ότι:

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

Η διαδικασία απεικονίζεται στο σχήμα 2.5.

2.2.4 Αναζήτηση Fibonacci

Από τα προηγούμενα, αναδεικνύεται το ερώτημα αν υπάρχει κάποιος τύπος αναζήτησης που δίνει τη μέγιστη μείωση για κάποια επιλογή των εσωτερικών σημείων x_1, x_2 . Αν ο αριθμός των κλήσεων N θεωρηθεί γνωστός εξ' αρχής η βέλτιστη στρατηγική είναι γνωστή ως *αναζήτηση Fibonacci* που βρέθηκε πρώτα από τον Kiefer.

Το βασικό μειονέκτημα των δύο μεθόδων που περιγράφηκαν προηγουμένως, είναι ότι για κάθε συρρίκνωση του διαστήματος χρειάζονται δύο νέες κλήσεις της συνάρτησης. Η δυνατότητα να μειωθεί το διάστημα μετά από μία μόνο νέα κλήση της συνάρτησης οδηγεί στη βέλτιστη στρατηγική. Αν x_0 και x_3 είναι τα άκρα του διαστήματος, θεωρήστε την επανάληψη i , όπου

$$x_0^{(i)} < x_1^{(i)} < x_2^{(i)} < x_3^{(i)}$$

Χωρίς βλάβη της γενικότητας υποθέτουμε ότι τα άκρα του αρχικού διαστήματος αβεβαιότητας είναι:

$$x_0^{(1)} = 0 \quad x_3^{(1)} = 1$$

Το μήκος του διαστήματος είναι:

$$d^{(i)} = x_3^{(i)} - x_0^{(i)}$$

Επίσης το μήκος των δύο επιμέρους διαστημάτων είναι:

$$a_i d^{(i)} = x_1^{(i)} - x_0^{(i)}$$

$$b_i d^{(i)} = x_2^{(i)} - x_0^{(i)}$$

Η βέλτιστη επιλογή των εσωτερικών σημείων βασίζεται στις επόμενες τρεις υποθέσεις:

Υπόθεση A: Τα σημεία $x_1^{(i)}, x_2^{(i)}$ είναι συμμετρικά ως προς το κέντρο του διαστήματος $[x_0^{(i)}, x_3^{(i)}]$.

Αυτό σημαίνει ότι:

$$a_i + b_i = 1 \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (2.1)$$

Θεωρήστε την επόμενη επανάληψη ($i+1$). Αν υποθέσουμε ότι $f(x_2^{(i)}) \geq f(x_1^{(i)})$, τότε

$$x_0^{(i+1)} = x_0^{(i)}$$

$$x_3^{(i+1)} = x_2^{(i)}$$

Υπόθεση B: Απαιτούμε $x_2^{(i+1)} = x_1^{(i)}$ για να γλυτώσουμε μια κλήση της συνάρτησης.

Χρησιμοποιούμε δηλαδή ένα εκ των δύο εσωτερικών σημείων της προηγούμενης επανάληψης. Αυτό μας οδηγεί στις σχέσεις:

$$\begin{aligned} x_3^{(i+1)} - x_0^{(i+1)} &= d^{(i+1)} = x_2^{(i)} - x_0^{(i)} = b_i d^{(i)} \\ x_2^{(i+1)} - x_0^{(i+1)} &= b_{i+1} d^{(i+1)} = x_1^{(i)} - x_0^{(i)} = a_i d^{(i)} \end{aligned}$$

Με συνδυασμό των ανωτέρων σχέσεων βρίσκουμε

$$b_{i+1} b_i = a_i \quad i = 1, 2, \dots, N-2$$

Συνδυάζοντας με την (2.1) βρίσκουμε την παρακάτω μη γραμμική αναδρομική σχέση για τα b_i :

$$b_i (b_{i+1} + 1) = 1 \quad i = 1, 2, \dots, N-2 \quad (2.2)$$

Αν το b_1 ήταν γνωστό τότε όλα τα b_i για $i > 1$ θα μπορούσαν να υπολογιστούν από την ανωτέρω σχέση. Αντί για αυτό η σχέση επιλύεται αντίστροφα, ξεκινώντας με το b_{N-1} .

Υπόθεση Γ: Απαιτούμε $b_{N-1} = \frac{1}{2}$, δηλαδή διχοτόμηση του τελικού διαστήματος.

Αυτό δείχνει γιατί η βέλτιστη αναζήτηση απαιτεί ένα σταθερό γνωστό αριθμό κλήσεων της συνάρτησης. Μιλώντας αυστηρά, η σχέση $b_{N-1} = \frac{1}{2}$ αντιβαίνει τη συνθήκη $x_1^{(N-1)} < x_2^{(N-1)}$, οπότε οι τελικές τιμές θα πρέπει να χωρίζονται με κάποια μικρή τιμή ε , με τον ίδιο τρόπο όπως και για την αναζήτηση διχοτόμησης.

Αν r_j είναι ο συντελεστής μείωσης μετά από j κλήσεις της συνάρτησης, τότε μετά από δύο κλήσεις έχουμε $r_2 = b_1$, μετά από τρεις κλήσεις $r_3 = b_2 b_1$, και γενικά μετά από N κλήσεις:

$$r_N = b_{N-1} b_{N-2} \dots b_1 \quad (2.3)$$

Ειδικά, μετά από την πρώτη κλήση, δεν υπάρχει μείωση του διαστήματος αβεβαιότητας: $r_1 = 1$. Ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$r_i = b_{i-1} r_{i-1} \quad i = 2, \dots, N \quad (2.4)$$

$$r_i = b_{i-1} b_{i-2} r_{i-2} \quad i = 3, \dots, N \quad (2.5)$$

Αντικαθιστώντας την (2.2) στην (2.5) και χρησιμοποιώντας την (2.4) λαμβάνουμε:

$$r_i = (1 - b_{i-2}) r_{i-2} = r_{i-2} - r_{i-1} \quad i = 3, \dots, N$$

Αντί να επιλύσουμε την (2.2) είναι πιο βολικό να λύσουμε το πρόβλημα:

$$r_{i-2} = r_i + r_{i-1} \quad i = 3, \dots, N$$

με $r_1 = 1, r_N = b_{N-1}r_{N-1}$, όπου $b_{N-1} = \frac{1}{2}$. Συνεπώς τα μέλη της ακολουθίας r_i είναι:

$$\begin{aligned} r_{N-1} &= 2r_N \\ r_{N-2} &= 3r_N \\ r_{N-3} &= 5r_N \end{aligned}$$

Οι αριθμοί 2, 3, 5, ... ονομάζονται αριθμοί Fibonacci και ικανοποιούν την αναδρομική σχέση:

$$F_j = F_{j-1} + F_{j-2} \quad F_0 = 1 \quad F_1 = 1$$

Οπότε η ακολουθία των συντελεστών μείωσης γράφεται ως:

$$r_i = F_{N-i+1}r_N, \quad i = 1, \dots, N$$

Με $r_1 = 1$ έχουμε $r_N = \frac{1}{F_N}$, άρα

$$r_i = \frac{F_{N-i+1}}{F_N} \quad i = 1, \dots, N$$

Η τελική κλήση χωρίζει τα τελευταία δύο σημεία κατά ε , οπότε η αληθινή μείωση είναι $r'_N = \frac{1}{F_N} + \varepsilon$. Για μια προκαθορισμένη ακρίβεια δ , το N πρέπει να επιλεγεί έτσι ώστε να ικανοποιεί τη σχέση

$$\frac{1}{F_N} + \varepsilon \leq \delta$$

ή αλλιώς

$$F_N \geq \frac{1}{\delta + \varepsilon}$$

Οι αριθμοί Fibonacci έχουν την αναλυτική αναπαράσταση:

$$F_N = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \left[\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \right]^{N+1} - \left[\frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}) \right]^{N+1} \right\}$$

οπότε για μεγάλο N και παραλείποντας το ε παίρνουμε:

$$r_N \approx \frac{2\sqrt{5}}{1 + \sqrt{5}} \frac{1}{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^N} \approx \frac{1.3817}{1.61803^N}$$

που είναι πιο αποδοτικό από την αναζήτηση με διχοτόμηση.

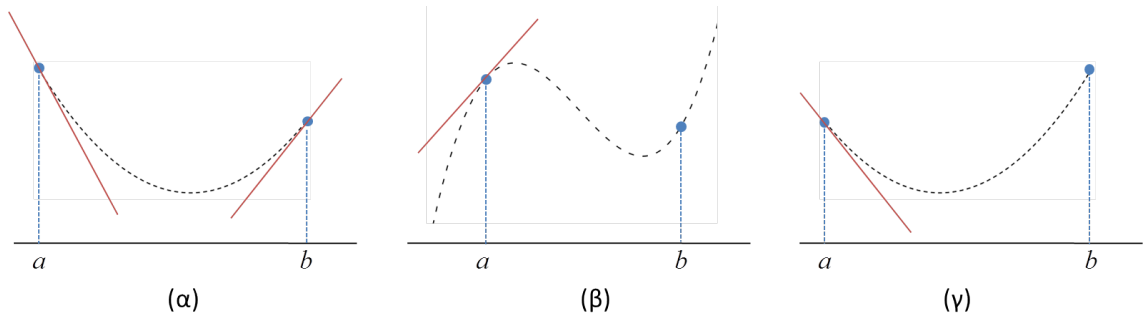
2.2.5 Αναζήτηση χρυσής τομής

Προφανώς η υπόθεση Γ, η διχοτόμηση του τελικού διαστήματος, οδηγεί στον περιορισμό της αναζήτησης Fibonacci, δηλαδή τον σταθερό αριθμό των κλήσεων της συνάρτησης. Η αναζήτηση χρυσής τομής δεν προδιαγράφει τον αριθμό των αποτιμήσεων της συνάρτησης εκ των προτέρων, διατηρεί τις υποθέσεις A και B και επιπλέον απαιτεί:

Υπόθεση Δ: Τα b_i είναι ανεξάρτητα από το i (ίδιο b σε κάθε επανάληψη).

Η υπόθεση αυτή ισχύει ασυμπτωτικά για την αναζήτηση Fibonacci, όπου ο λόγος

$$b_i = \frac{r_{i+1}}{r_i} = \frac{F_{N-i}}{F_{N-i+1}}$$



Σχήμα 2.6: Οι διαφορετικοί τρόποι ορισμού διαστήματος αβεβαιότητας με χρήση παραγώγων.

είναι σχεδόν σταθερός για μεγάλα N και i όχι πολύ κοντά στο N . Η υπόθεση Δ αν εφαρμοστεί στην (2.2) δίνει:

$$b^2 + b - 1 = 0 \quad (2.6)$$

ή

$$b = \frac{1}{2}(\sqrt{5} - 1) = \frac{2}{\sqrt{5} - 1} \approx 0.618033988$$

Η σχέση συμμετρίας (2.1) εξακολουθεί να ισχύει: $a + b = 1$. Τότε η (2.6) είναι ισοδύναμη με:

$$\frac{1}{b} = \frac{b}{a}$$

Αυτός είναι ο κανόνας της χρυσής τομής.

Ο συντελεστής μείωσης μετά από N κλήσεις προκύπτει από την (2.3) ως $r_N = b^{N-1}$, δηλαδή το μήκος του διαστήματος αβεβαιότητας μειώνεται με γεωμετρική πρόοδο.

Συγκρίνοντας τις τέσσερις μεθόδους έχουμε:

1. Αναζήτηση ίσων διαστημάτων $r_N = \frac{2}{3}^N \approx \frac{1}{1.225^N}$
2. Αναζήτηση διχοτόμησης $r_N = \frac{1}{2}^N \approx \frac{1}{1.414^N}$
3. Αναζήτηση Fibonacci $r_N = \frac{1}{F_N} \approx \frac{1.3817}{1.618^N}$
4. Αναζήτηση χρυσής τομής $r_N = b^{N-1} \approx \frac{1.618}{1.618^N}$

2.3 Διχοτόμηση με χρήση της παραγώγου

Εάν μπορούμε να υπολογίσουμε την τιμή της παραγώγου $f'(x)$, τότε οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες έτσι ώστε ένα διάστημα $[a, b]$ να αποτελεί διάστημα αβεβαιότητας είναι:

$$\begin{aligned} & f'(a) < 0, \quad f'(b) > 0 && \text{σχ. 2.6α} \\ \text{ή} & f'(a) < 0, \quad f(b) > f(a) && \text{σχ. 2.6β} \\ \text{ή} & f'(a) > 0, \quad f'(b) > 0, \quad f(b) < f(a) && \text{σχ. 2.6γ} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Σε αυτή την περίπτωση το διάστημα αβεβαιότητας μπορεί να μειωθεί ως εξής: Θεωρήστε ότι $[a, b]$ είναι το αρχικό διάστημα αβεβαιότητας που φράσσει το ελάχιστο. Υπολογίζουμε το μέσο του διαστήματος $c = \frac{a+b}{2}$ και την τιμή της συνάρτησης και της παραγώγου σε αυτό το σημείο. Κατόπιν εξετάζουμε σε ποιο από τα δύο διαστήματα $[a, c]$ ή $[c, b]$ ισχύει κάποια από τις συνθήκες (2.7) και θέτουμε το διάστημα αυτό ως νέο διάστημα αβεβαιότητας.

Είναι φανερό ότι σε κάθε επανάληψη το μήκος του διαστήματος μειώνεται στο μισό, όμως η απόδοση της μεθόδου δεν μπορεί να συγκριθεί άμεσα με αυτές των μεθόδων της παραγράφου 2.2 αφού σε κάθε επανάληψη υπολογίζεται και η παράγωγος της συνάρτησης, οπότε το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη είναι διαφορετικό.

2.4 Τεχνικές προσέγγισης της συνάρτησης

Οι τεχνικές των προηγούμενων παραγράφων μπορούν να εφαρμοστούν μόνο εάν η συνάρτηση $f(x)$ είναι μονότροπη. Το πλεονέκτημά τους είναι ότι φράσσουν το ελάχιστο είτε με μια προκαθορισμένη ακρίβεια, οπότε το πλήθος αποτιμήσεων της συνάρτησης είναι σταθερό, ή με ένα δοθέν πλήθος κλήσεων της συνάρτησης, οπότε η ακρίβεια δεν μπορεί πλέον να επιλεγεί ελεύθερα.

Ανεξάρτητα από το γεγονός ότι σχεδόν πάντα η συνάρτηση $f(x)$ δεν είναι γνωστό εξαρχής αν είναι κυρτή, οι μέθοδοι που βασίζονται σε σύγκριση μόνο των τιμών της συνάρτησης, σπαταλάνε πληροφορία: χρησιμοποιούν την τιμή της συνάρτησης μόνο για συγκρίσεις. Στις επόμενες παραγράφους περιγράψουμε μερικές μεθόδους που χρησιμοποιούν αυτή την πληροφορία, καταλήγοντας σε πολυωνυμική παρεμβολή χαμηλής τάξης.

2.4.1 Τετραγωνική παρεμβολή

Θεωρήστε ένα αρχικό διάστημα αβεβαιότητας $[a, b]$ και ένα σημείο c εντός του διαστήματος. Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα πολυώνυμο δεύτερου βαθμού της μορφής $P(x) = px^2 + qx + r$, για να παρεμβάλλουμε τα τρία σημεία a, b, c . Το πολυώνυμο αυτό είναι το πολυώνυμο Lagrange που για μια σειρά σημείων x_1, x_2, \dots έχει τη γενική μορφή:

$$P(x) = \sum_i f_i L_i(x)$$

με

$$L_i(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}$$

Το πολυώνυμο έχει ελάχιστο αν $p > 0$ στη θέση $\tilde{x} = c + s$, με

$$s = \frac{1}{2} \frac{(c-b)^2(f_c - f_a) + (a-c)^2(f_b - f_c)}{(b-c)(f_c - f_a) + (a-c)(f_b - f_c)}$$

Η αντικειμενική συνάρτηση υπολογίζεται στο σημείο \tilde{x} και κατόπιν επιλέγεται ένα νέο διάστημα αβεβαιότητας.

Αλγόριθμος τετραγωνικής παρεμβολής:

1. Δίδονται ως είσοδος το αρχικό διάστημα αβεβαιότητας $[a, b]$ και ένα ενδιάμεσο σημείο c .
2. Ελέγχουμε αν ικανοποιούνται τα κριτήρια τερματισμού.
3. Υπολογίζουμε το σημείο \tilde{x} με τετραγωνική παρεμβολή και την τιμή της συνάρτησης $\tilde{f} = f(\tilde{x})$.
4. Επιλέγουμε ένα νέο διάστημα αβεβαιότητας ως εξής:

$$- \tilde{x} < c$$

- Αν $\tilde{f} < f_c$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[a, c]$ με ενδιάμεσο σημείο το \tilde{x} .

- Αν $\tilde{f} \geq f_c$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[\tilde{x}, b]$ με ενδιάμεσο σημείο το c .

- $\tilde{x} \geq c$
- Αν $\tilde{f} < f_c$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[c, b]$ με ενδιάμεσο σημείο το \tilde{x} .
- Αν $\tilde{f} \geq f_c$ τότε το νέο διάστημα αβεβαιότητας είναι το $[a, \tilde{x}]$ με ενδιάμεσο σημείο το c .

5. Επαναλαμβάνουμε από το βήμα 2.

2.4.2 Κριτήρια τερματισμού

Συνήθη κριτήρια τερματισμού είναι:

- Το μήκος του διαστήματος είναι μικρότερο από μια προκαθορισμένη ακρίβεια: $b - a < \epsilon_x$.
- Η σχετική μείωση στην τιμή της συνάρτησης μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων είναι μικρότερη από μια προκαθορισμένη ακρίβεια: $\left| \frac{f_c^{(k)} - f_c^{(k-1)}}{f_c^{(k-1)}} \right| < \epsilon_f$
- Ο συνολικός αριθμός κλήσεων της συνάρτησης που πραγματοποιήθηκαν δεν υπερβαίνουν ένα δοσμένο άνω όριο.

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης χωρίς παραγώγους

3.1 Μέθοδος Simplex

Η μέθοδος Simplex¹ προτάθηκε το 1965 από τους Nedler και Mead και είναι βασισμένη σε αντίστοιχες παλαιότερες ιδέες. Έκτοτε, έχουν προταθεί διάφορες βελτιώσεις η βασική δομή όμως παραμένει η ίδια.

Το simplex είναι ένα γεωμετρικό αντικείμενο, το οποίο αποτελείται (για μία συνάρτηση N μεταβλητών) από $N + 1$ σημεία (ή κορυφές) στο χώρο, με συντεταγμένες \mathbf{x}_i . Σε δύο διαστάσεις, το simplex είναι ένα τρίγωνο, σε τρεις ένα τετράεδρο (όχι αναγκαστικά κανονικό), κοκ. Η μέθοδος Simplex έχει ως εξής (δείτε σχ. 3.1):

Αρχικά προσδιορίζονται οι $N + 1$ κορυφές \mathbf{x}_i και οι αντίστοιχες τιμές της συνάρτησης $f_i = f(\mathbf{x}_i)$. Το αρχικό simplex είναι δυνατόν να κατασκευαστεί με διάφορους τρόπους:

- Οι αρχικές κορυφές \mathbf{x}_i επιλέγονται με τυχαίο τρόπο.
- Πραγματοποιείται μία όχι ιδιαίτερα ακριβής γραμμική αναζήτηση σε κάθε διεύθυνση \hat{e}_i , και το ελάχιστο χρησιμοποιείται ως η τιμή της κορυφής \mathbf{x}_i . Η μέθοδος αυτή είναι και η πλέον δαπανηρή σε κλήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης.
- Το simplex κατασκευάζεται “γύρω” από ένα σημείο \mathbf{z} ως εξής: $\mathbf{x}_i = \mathbf{z} + c z_i \hat{e}_i$. Η σταθερά c επιλέγεται αυθαίρετα, πχ. $c = 0.1$

Και ενώ το αρχικό simplex έχει φανερή επίπτωση στην απόδοση της μεθόδου, δεν υπάρχουν σαφείς ενδείξεις για το ποια από τις παραπάνω επιλογές είναι η καλύτερη. Η τρίτη επιλογή είναι η πλέον συνηθισμένη.

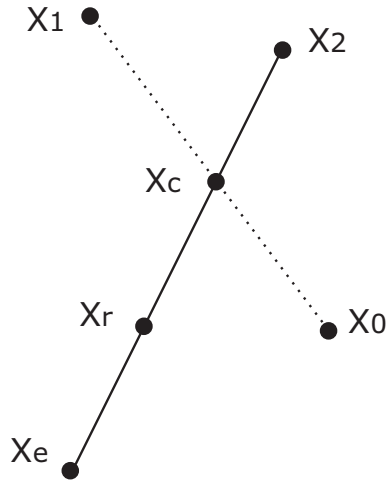
Οι κορυφές αριθμούνται έτσι ώστε $f_0 < f_1 < \dots < f_N$. Η φιλοσοφία της μεθόδου είναι να αντικαταστήσει το “χειρότερο” σημείο f_N με ένα καινούργιο με χαμηλότερη τιμή συνάρτησης. Για το σκοπό αυτό υπολογίζεται το κέντρο \mathbf{x}_c των υπόλοιπων (εκτός του \mathbf{x}_N) σημείων.

$$\mathbf{x}_c = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \mathbf{x}_i \quad (3.1)$$

Το σημείο \mathbf{x}_N προβάλλεται διαμέσου του \mathbf{x}_c , πάνω στη διεύθυνση $\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_N$, και δίνει

$$\mathbf{x}_r = \mathbf{x}_c + \alpha(\mathbf{x}_c - \mathbf{x}_N) \quad (3.2)$$

¹ Δεν πρέπει να συγχέεται με την μέθοδο Simplex του γραμμικού προγραμματισμού.



Σχήμα 3.1: Μέθοδος Simplex. Φαίνονται οι τρεις κορυφές x_0, x_1, x_2 δισδιάστατης συνάρτησης.

Η σταθερά α ονομάζεται συντελεστής προβολής (τυπική τιμή $\alpha = 1$). Κατόπιν η αντικατάσταση του x_N γίνεται εξετάζοντας τις παρακάτω τρεις περιπτώσεις:

1. $f_0 \leq f_r \leq f_{N-1}$
Το σημείο x_r αντικαθιστά το x_N και η διαδικασία επαναλαμβάνεται.
2. $f_r < f_0$. Το x_r είναι ένα νέο “καλύτερο” σημείο.
Εφαρμόζεται επέκταση κατά μήκος της διεύθυνσης $x_r - x_c$ δίνοντας ένα νέο σημείο:

$$x_e = x_c + \gamma(x_r - x_c) \quad (3.3)$$

Η σταθερά γ ονομάζεται συντελεστής επέκτασης (τυπική τιμή $\gamma = 2$). Αν $f_e < f_r$, η επέκταση είναι επιτυχής και το νέο σημείο x_e αντικαθιστά το x_N . Ειδάλλως το x_r αντικαθιστά το x_N .

3. $f_r > f_{N-1}$. Το x_r είναι ένα νέο “χειρότερο” σημείο.
Εφαρμόζεται συστολή που δίνει ένα νέο σημείο:

$$x_k = \begin{cases} x_c + \beta(x_r - x_c) & \text{εάν } f_r < f_N \text{ (εξωτερική συστολή)} \\ x_c + \beta(x_N - x_c) & \text{εάν } f_r \geq f_N \text{ (εσωτερική συστολή)} \end{cases} \quad (3.4)$$

Εάν $f_k < f_r$ και $f_k < f_N$, τότε το x_k αντικαθιστά το x_N , ειδάλλως όλο το simplex συρρικνώνεται, αντικαθιστώντας την κάθε κορυφή x_i από

$$x_i \leftarrow \frac{1}{2}(x_i + x_0) \quad (3.5)$$

Η σταθερά β ονομάζεται συντελεστής συστολής (τυπική τιμή $\beta = \frac{1}{2}$).

Για τον τερματισμό της μεθόδου χρησιμοποιείται ένα απλό κριτήριο: Υπολογίζεται ο μέσος όρος \bar{f} των τιμών της συνάρτησης

$$\bar{f} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^N f_i$$

και η διακύμανση σ του μέσου όρου:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (f_i - \bar{f})^2$$

Η μέθοδος τερματίζεται όταν η διακύμανση σ γίνει μικρότερη από μια προκαθορισμένη τιμή.

Η μέθοδος Simplex έχει μία σειρά από πλεονεκτήματα που την καθιστούν ιδιαίτερα επιτυχή σε συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Καταρχήν είναι εξαιρετικά απλή στην υλοποίηση. Χρησιμοποιεί μόνο τιμές της συνάρτησης $f(x)$ και όχι των παραγώγων. Επιπλέον είναι ανεκτική όταν οι τιμές της συνάρτησης περιέχουν θόρυβο. Είναι όμως εξαιρετικά αργή για μεγάλο αριθμό μεταβλητών ($N > 10$) και επιπλέον δεν υπάρχει αρκετή θεωρητική τεκμηρίωση για τις ιδιότητες της μεθόδου.

Κεφάλαιο 4

Μέθοδοι πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης με παραγώγους

4.1 Βασικές έννοιες

Όλες οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης είναι επαναληπτικές. Ξεκινώντας από ένα αρχικό σημείο $\mathbf{x}^{(0)}$, παράγουν διαδοχικά σημεία $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$, τα οποία τελικά συγκλίνουν στο σημείο \mathbf{x}^* στο οποίο η $f(\mathbf{x})$ παρουσιάζει ελάχιστο. Ο εκθέτης (k) δηλώνει τον αριθμό της επανάληψης.

Σχεδόν σε όλες τις μεθόδους υπάρχουν έλεγχοι που επιβάλλουν σε κάθε επανάληψη την *ιδιότητα μείωσης*:

$$f(\mathbf{x}^{(k+1)}) < f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (4.1)$$

Οι ιδιότητες σύγκλισης ενός αλγορίθμου ελαχιστοποίησης περιγράφονται από δύο ποσότητες: την *τάξη σύγκλισης* και το *λόγο σύγκλισης*. Μια ακολουθία σημείων $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$ συγκλίνει στην τιμή \mathbf{x}^* όταν:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\| = 0$$

Η ακολουθία συγκλίνει στο \mathbf{x}^* με τάξη p , αν ο p είναι ο μεγαλύτερος μη αρνητικός αριθμός, για τον οποίο υπάρχει ένα πεπερασμένο όριο β , τέτοιο ώστε:

$$0 \leq \beta \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\|^p}$$

Όταν $p = 1$ και $\beta < 1$, η ακολουθία συγκλίνει *γραμμικά*. Όταν $p = 1$ και $\beta = 0$ η ακολουθία συγκλίνει *υπεργραμμικά*, ενώ όταν $p = 2$ έχουμε *τετραγωνική σύγκλιση*.

Μια μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης έχει *καθολική σύγκλιση* όταν συγκλίνει στον ελαχιστοποιητή \mathbf{x}^* , ξεκινώντας από οποιοδήποτε αρχικό σημείο $\mathbf{x}^{(0)}$ που δεν βρίσκεται κοντά στο \mathbf{x}^* . Ο όρος “καθολική σύγκλιση” δεν πρέπει να συγχέεται με τις μεθόδους ολικής βελτιστοποίησης που αναζητούν το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης.

4.2 Τετραγωνικό μοντέλο μονοδιάστατης συνάρτησης

Οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης συνήθως βασίζονται σε ένα *μοντέλο*, δηλαδή μια απλή προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης, η οποία επιτρέπει την αναλυτική πρόβλεψη του ελαχίστου. Το πιο επιτυχημένο και πλέον χρησιμοποιούμενο είναι το τετραγωνικό μοντέλο. Βασίζεται στην ανάπτυξη της

αντικειμενικής συνάρτησης σε σειρά Taylor. Για μονοδιάστατη συνάρτηση το ανάπτυγμα Taylor γύρω από ένα σημείο a είναι:

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{1}{2}(x-a)^2 f''(a) + \frac{1}{3!}(x-a)^3 f'''(a) + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(x-a)^k}{k!} f^{(k)}(x-a) \quad (4.2)$$

Το τετραγωνικό μοντέλο $q(x)$ προκύπτει αν κρατήσουμε τους όρους μέχρι δεύτερης τάξης.

$$f(x) \approx q(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{1}{2}(x-a)^2 f''(a) \quad (4.3)$$

Υπάρχουν πολλοί λόγοι για την επιλογή ενός τέτοιου μοντέλου

- Η τετραγωνική συνάρτηση είναι από τις πιο απλές ομαλές συναρτήσεις με καλώς ορισμένο ακρότατο.
- Μια οποιαδήποτε γενική μη γραμμική συνάρτηση σε μια μικρή περιοχή γύρω από ένα τοπικό ελάχιστο, μπορεί να προσεγγιστεί επαρκώς από μία τετραγωνική συνάρτηση.
- Ακόμα και μακριά από το ελάχιστο, φαίνεται προτιμότερο να χρησιμοποιεί κανείς την τετραγωνική προσέγγιση η οποία είναι πιο αποτελεσματική από τη γραμμική προσέγγιση στην πρόβλεψη διευθύνσεων κατά μήκος των οποίων η τιμή της συνάρτησης μειώνεται. Αυτό συνδέεται με το γεγονός ότι μία σειρά Taylor γύρω από ένα οποιοδήποτε σημείο x , για δεδομένη ακρίβεια, συμφωνεί με την $f(x)$ σε πολύ μεγαλύτερη περιοχή αν κρατηθούν όροι δεύτερης τάξης, από ότι αν κρατήσουμε μόνο τον γραμμικό όρο.

Όλες οι μέθοδοι που θα περιγραφούν στη συνέχεια, βασίζονται στο τετραγωνικό μοντέλο.

4.3 Παραβολή σε πολλές διαστάσεις

Μια παραβολή σε πολλές διαστάσεις γράφεται ως:

$$q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \quad (4.4)$$

όπου \mathbf{A} είναι συμμετρικός πίνακας $N \times N$, \mathbf{b} είναι διάνυσμα και c είναι σταθερά.

Για να βρούμε το ακρότατο της παραβολής υπολογίζουμε πρώτα το διάνυσμα των πρώτων παραγώγων.

$$\nabla q(\mathbf{x}) = \nabla \left(\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c \right) = \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (4.5)$$

Κατόπιν βρίσκουμε το σημείο που μηδενίζονται οι παράγωγοι:

$$\nabla q(\mathbf{x}) = 0 \Rightarrow \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{b} = 0 \Rightarrow \mathbf{x} = -\mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} \quad (4.6)$$

Το είδος του ακρότατου προσδιορίζεται από τον πίνακα των δευτέρων παραγώγων:

$$\nabla^2 q(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \quad (4.7)$$

Συνεπώς ο πίνακας \mathbf{A} καθορίζει το είδος του ακρότατου.

4.4 Τετραγωνικό μοντέλο πολυδιάστατης συνάρτησης

Για πολυδιάστατη συνάρτηση το τετραγωνικό μοντέλο γύρω από ένα σημείο \mathbf{a} προκύπτει από το ανάπτυγμα Taylor όπου κρατάμε τους όρους μέχρι και δεύτερης τάξης και γράφεται ως:

$$f(\mathbf{x}) \approx q(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a}) + \mathbf{g}^T (\mathbf{x} - \mathbf{a}) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{a})^T \mathbf{G} (\mathbf{x} - \mathbf{a}) \quad (4.8)$$

όπου \mathbf{g} είναι το διάνυσμα των πρώτων παραγώγων και \mathbf{G} είναι ο πίνακας των δευτέρων παραγώγων, υπολογισμένα στο σημείο \mathbf{a} .

Εναλλακτικά, θέτοντας $\mathbf{p} = \mathbf{x} - \mathbf{a}$ το τετραγωνικό μοντέλο μπορεί να γραφεί ως:

$$q(\mathbf{p}) = f(\mathbf{a}) + \mathbf{g}(\mathbf{a})^T \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{G}(\mathbf{a}) \mathbf{p} \quad (4.9)$$

Όπως μπορεί εύκολα να επιβεβαιωθεί το τετραγωνικό μοντέλο (4.8) μπορεί να γραφεί στη μορφή (4.4) θέτοντας $\mathbf{A} = \mathbf{G}$, $\mathbf{b} = \mathbf{g} - \mathbf{G}\mathbf{a}$ και $c = \frac{1}{2} \mathbf{a}^T \mathbf{G} \mathbf{a} - \mathbf{g}^T \mathbf{a} + f(\mathbf{a})$. Αντικαθιστώντας τις τιμές αυτές στην (4.6) βρίσκουμε το ακρότατο του τετραγωνικού μοντέλου:

$$\mathbf{x}^* = -\mathbf{G}^{-1} \mathbf{b} = -\mathbf{G}^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{G}\mathbf{a}) = -\mathbf{G}^{-1} \mathbf{g} + \mathbf{a} \quad (4.10)$$

4.5 Η βασική δομή μιας μεθόδου

Ο βασικός επαναληπτικός αλγόριθμος μιας μεθόδου πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης έχει ως εξής:

1. Δίνεται αρχικό σημείο $\mathbf{x}^{(0)}$.
2. Επανάληψη για $k = 0, 1, 2, \dots$
 - (α') Έλεγχος των κριτηρίων τερματισμού.
 - (β') Προσδιορίζουμε ένα βήμα $\mathbf{h}^{(k)}$ τέτοιο ώστε $f(\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{h}^{(k)}) < f(\mathbf{x}^{(k)})$
 - (γ') Θέτουμε $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{h}^{(k)}$

Υπάρχουν δύο βασικές κατηγορίες μεθόδων για τον προσδιορισμό του βήματος $\mathbf{h}^{(k)}$

- *Μέθοδοι με γραμμική αναζήτηση*
Για να βρεθεί το βήμα $\mathbf{h}^{(k)}$ γίνεται γραμμική αναζήτηση, δηλαδή εύρεση του ελαχίστου της συνάρτησης πάνω σε μια προκαθορισμένη διεύθυνση \mathbf{s} .
- *Μέθοδοι διαστημάτων εμπιστοσύνης*
Το $\mathbf{h}^{(k)}$ προσδιορίζεται από το ελάχιστο του τετραγωνικού μοντέλου μέσα σε μια "υπερσφαίρα" ακτίνας Δ , μέσα στην οποία το τετραγωνικό μοντέλο προσεγγίζει ικανοποιητικά τη συνάρτηση

Οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης τερματίζουν τη λειτουργία τους όταν ικανοποιείται κάποιο από τα κριτήρια τερματισμού:

- Η παράγωγος είναι μικρή:

$$\text{relgrad} = \frac{\text{Ρυθμός αλλαγής της } f(\mathbf{x})}{\mathbf{x}} = \frac{\nabla f(\mathbf{x}) \mathbf{x}}{f(\mathbf{x})} < \varepsilon_g \quad (4.11)$$

– Οι μεταβλητές συγκλίνουν αργά:

$$\frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|} < \varepsilon_x \quad (4.12)$$

– Η τιμή της συνάρτησης συγκλίνει αργά:

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f(\mathbf{x}^{(k+1)}) < \varepsilon_f \quad (4.13)$$

– Το πλήθος των υπολογισμών της συνάρτησης υπερβαίνει ένα μέγιστο n_{max} .

4.6 Φθίνουσες διευθύνσεις

Οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης που χρησιμοποιούν γραμμική αναζήτηση παράγουν *φθίνουσες διευθύνσεις*, δηλαδή διευθύνσεις \mathbf{s} τέτοιες ώστε η τιμή της συνάρτησης να μειώνεται κατά μήκος της διεύθυνσης \mathbf{s} :

$$f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}) < f(\mathbf{x}) \quad \alpha > 0$$

Αναπτύσσοντας κατά Taylor την $f(\mathbf{x})$ γύρω από το σημείο \mathbf{x} και κρατώντας μόνο τον γραμμικό όρο:

$$f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}) \approx f(\mathbf{x}) + \alpha\mathbf{g}^T\mathbf{s}$$

Όμως επειδή $\alpha > 0$, και χρησιμοποιώντας την ιδιότητα μείωσης (4.1), βρίσκουμε ότι οι φθίνουσες διευθύνσεις πρέπει να ικανοποιούν τη σχέση:

$$\mathbf{g}^T\mathbf{s} < 0 \quad (4.14)$$

4.7 Η διεύθυνση της πιο απότομης καθόδου

Από όλες τις δυνατές διευθύνσεις \mathbf{s} , αυτή που παρουσιάζει τη μέγιστη μείωση της συνάρτησης κατά μήκος της, ονομάζεται *διεύθυνση της πιο απότομης καθόδου*. Η μείωση κατά μήκος της \mathbf{s} είναι $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s})$. Αναπτύσσοντας κατά Taylor την $f(\mathbf{x})$ και κρατώντας μόνο τον γραμμικό όρο βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}) &= f(\mathbf{x}) - (f(\mathbf{x}) + \alpha\mathbf{s}^T\mathbf{g}) \\ &= -\alpha\mathbf{s}^T\mathbf{g} = -\alpha\|\mathbf{s}\|\|\mathbf{g}\|\cos\theta \end{aligned}$$

όπου θ η γωνία μεταξύ \mathbf{s} και \mathbf{g} . Η μείωση γίνεται μέγιστη όταν $\cos\theta = -1$ ή αλλιώς όταν $\theta = \pi$, δηλαδή όταν το \mathbf{s} είναι συγγραμμικό με το \mathbf{g} και έχει αντίθετη φορά: $\mathbf{s} = -\mathbf{g}$. Μπορεί κανείς να επιβεβαιώσει ότι η διεύθυνση αυτή είναι όντως διεύθυνση μείωσης, αφού

$$\mathbf{s}^T\mathbf{g} = -\mathbf{g}^T\mathbf{g} = -\|\mathbf{g}\|^2 < 0$$

4.8 Γραμμική αναζήτηση

Η γραμμική αναζήτηση είναι βασικό στοιχείο σε μια μεγάλη κατηγορία μεθόδων ελαχιστοποίησης. Η γενική δομή ενός αλγορίθμου που χρησιμοποιεί γραμμική αναζήτηση έχει ως εξής:

1. Δίνεται ένα σημείο εκκίνησης $\mathbf{x}^{(0)}$.
2. Ελέγχονται τα κριτήρια τερματισμού.

3. Καθορίζεται μια διεύθυνση αναζήτησης $\mathbf{s}^{(k)}$
4. Πραγματοποιείται γραμμική αναζήτηση στη διεύθυνση $\mathbf{s}^{(k)}$, δηλαδή ελαχιστοποίηση της $\varphi(\alpha^{(k)}) = f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{s}^{(k)})$ ως προς $\alpha^{(k)}$.
5. Το νέο σημείο καθορίζεται ως: $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{s}^{(k)}$
6. Επανάληψη από το βήμα 2.

Οι διαφορετικές μέθοδοι ελαχιστοποίησης με γραμμική αναζήτηση, χρησιμοποιούν διαφορετικούς τρόπους επιλογής της διεύθυνσης $\mathbf{s}^{(k)}$. Πλήθος μεθόδων έχουν κατά καιρούς προταθεί για το πρόβλημα της γραμμικής αναζήτησης. Ένας καλός αλγόριθμος γραμμικής αναζήτησης μπορεί να έχει σημαντική επίδραση στην απόδοση της μεθόδου στην οποία χρησιμοποιείται.

Το πρόβλημα της γραμμικής αναζήτησης τίθεται ως εξής: Δεδομένης μιας διεύθυνσης αναζήτησης \mathbf{s} , ζητείται να βρεθεί α , τέτοιο ώστε η τιμή της συνάρτησης $f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s})$ να είναι ελάχιστη. Εφόσον τα \mathbf{x} και \mathbf{s} είναι σταθερά, για συντομία γράφουμε

$$\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}) \quad (4.15)$$

Οι παράγωγος της $\varphi(\alpha)$ είναι:

$$\varphi'(\alpha) = \frac{d\varphi(\alpha)}{d\alpha} = \mathbf{s}^T \mathbf{g}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}) \quad (4.16)$$

Θα πρέπει να σημειώσουμε ότι ο όρος γραμμική αναζήτηση δεν είναι συνώνυμος με την μονοδιάστατη ελαχιστοποίηση. Η διαφορά έγκειται στα κριτήρια τερματισμού και εξηγείται στην επόμενη παράγραφο. Ανάλογα με τη διαθεσιμότητα των πρώτων παραγώγων μπορούμε να τις χωρίσουμε ως εξής:

- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν τιμές της συνάρτησης και της παραγώγου της.
- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν τιμές της συνάρτησης μόνο. Σε αυτή την περίπτωση δεν υπάρχει πολλή θεωρία για το πώς θα πρέπει να γίνεται η γραμμική αναζήτηση. Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν οι μέθοδοι αναζήτησης με διαμέριση, διχοτόμησης, χρυσής τομής, Fibonacci, και άλλες. Οι πλέον επιτυχείς εντοπίζουν ένα διάστημα αβεβαιότητας, μέσα στο οποίο βρίσκεται το υπό εντοπισμό ελάχιστο. Με τη χρήση πολυωνυμικής παρεμβολής, το διάστημα αβεβαιότητας συρρικνώνεται, μέχρι το ελάχιστο να εντοπιστεί με την επιθυμητή ακρίβεια. Τυπικό παράδειγμα τέτοιας μεθόδου είναι η ιδιαίτερα δημοφιλής μέθοδος του Brent.

4.8.1 Γραμμική αναζήτηση με χρήση παραγώγων

Οι μέθοδοι ελαχιστοποίησης παράγουν φθίνουσες διευθύνσεις, δηλαδή διευθύνσεις για τις οποίες ισχύει

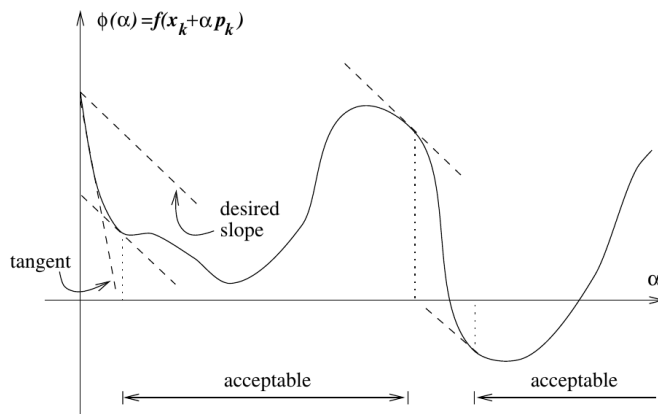
$$\mathbf{s}^T \mathbf{g} < 0 \quad (4.17)$$

Η εξ. (4.17) είναι ισοδύναμη με τη συνθήκη $\varphi'(0) < 0$, που δείχνει ότι η $\varphi(\alpha)$ μειώνεται για $\alpha > 0$. Το πρόβλημα της γραμμικής αναζήτησης δεν μπορεί να λυθεί ακριβώς σε ένα πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων. Επιπλέον δεν είναι αποδοτικό να αναζητούνται λύσεις υψηλής ακρίβειας όταν το \mathbf{x} είναι μακριά από τη λύση \mathbf{x}^* . Για το σκοπό αυτό αναζητούνται προσεγγιστικές λύσεις που ικανοποιούν συγκεκριμένα κριτήρια. Έτσι σε μία γραμμική αναζήτηση δεν αναζητείται το ελάχιστο της $\varphi(\alpha)$, αλλά ένα αποδεκτό σημείο το οποίο ικανοποιεί ταυτόχρονα τις συνθήκες

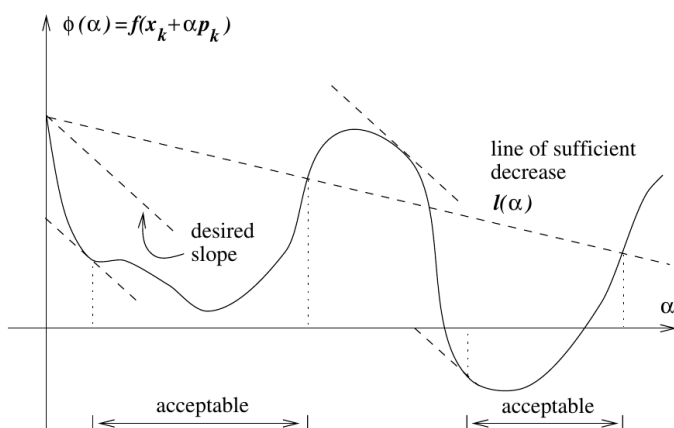
$$\varphi(\alpha) \leq \varphi(0) + \alpha\rho\varphi'(0) \quad (4.18)$$

και

$$\varphi'(\alpha) \geq \sigma\varphi'(0) \quad (4.19)$$



Σχήμα 4.1: Τα αποδεκτά σημεία με βάση τη συνθήκη 4.18.



Σχήμα 4.2: Τα αποδεκτά σημεία με βάση τις συνθήκες Wolfe-Powell.

που συνήθως αναφέρονται ως *συνθήκες Wolfe-Powell*. Οι προκαθορισμένες σταθερές ρ και σ επιλέγονται έτσι ώστε $0 < \rho < \frac{1}{2}$ και $\rho < \sigma < 1$. Η συνθήκη (4.18) απαιτεί η $\varphi(\alpha)$ να βρίσκεται χαμηλότερα από μια ευθεία που περνά από το σημείο $(0, \varphi(0))$ και έχει κλίση ρ φορές την κλίση $\varphi'(0)$ (σχ. 4.1). Η συνθήκη (4.19) απαιτεί η κλίση $\varphi'(\alpha)$ να είναι μεγαλύτερη ή ίση με σ φορές την αρχική κλίση $\varphi'(0)$ (σχ. 4.2). Στην πράξη χρησιμοποιείται η πιο ισχυρή συνθήκη

$$|\varphi'(\alpha)| \leq -\sigma\varphi'(0) \quad (4.20)$$

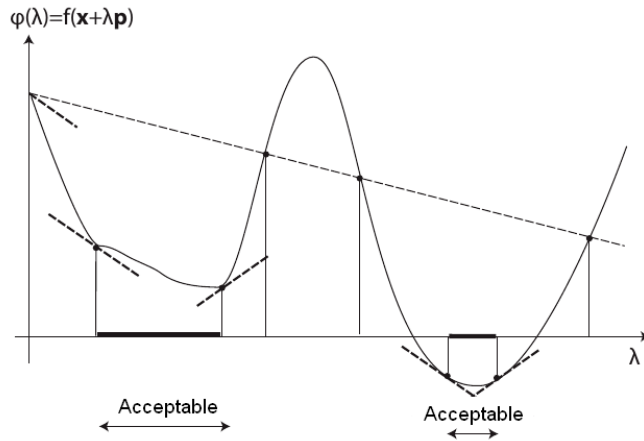
που μαζί με την (4.18) αναφέρονται ως *ισχυρές συνθήκες Wolfe-Powell*. Η διαφορά έγκειται στο γεγονός ότι ένα αποδεκτό σημείο όπως ορίζεται από τις (4.18) και (4.19) μπορεί να μην είναι κοντά στην ακριβή λύση α^* , ενώ μικραίνοντας την τιμή του σ στις (4.18) και (4.20) μπορούμε να βρούμε ένα αποδεκτό σημείο το οποίο να είναι όσο κοντά θέλουμε στην ακριβή λύση α^* (σχ. 4.3). Στην πράξη τιμές $\rho = 10^{-4}$ και $\sigma = 0.1$ είναι τυπικές για μια αρκετά ακριβή γραμμική αναζήτηση, ενώ η απόδοση των μεθόδων ελαχιστοποίησης είναι γενικά ανεπηρέαστη από αλλαγές στις σταθερές ρ και σ .

4.9 Η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου

Στη μέθοδο της πιο απότομης καθόδου επιλέγεται ως διεύθυνση γραμμικής αναζήτησης τη διεύθυνση της πιο απότομης καθόδου $s = g$. Ο αλγόριθμος έχει ως εξής:

Δίνεται αρχικό σημείο $x^{(0)}$.

Επανάληψη για $k = 1, 2, \dots$



Σχήμα 4.3: Τα αποδεκτά σημεία με βάση τις ισχυρές συνθήκες Wolfe-Powell.

1. Έλεγχος των κριτηρίων τερματισμού.
2. Γραμμική αναζήτηση κατά μήκος της διεύθυνσης $\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)}$, δηλαδή ελαχιστοποίηση της $\varphi(\alpha^{(k)}) = f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{s}^{(k)})$ ως προς $\alpha^{(k)}$.
3. Υπολογισμός του νέου σημείου $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\mathbf{s}^{(k)}$.

Στην πράξη η μέθοδος δεν χρησιμοποιείται κυρίως λόγω της αργής σύγκλισης και ταλαντευτικής συμπεριφοράς κοντά στο ελάχιστο.

4.10 Η μέθοδος Newton

Η μέθοδος Newton βασίζεται στην προσέγγιση της συνάρτησης σε κάθε επανάληψη από ένα τετραγωνικό μοντέλο.

$$f(\mathbf{x}) \approx q(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a}) + \mathbf{g}(\mathbf{a})^T (\mathbf{x} - \mathbf{a}) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{a})^T \mathbf{G}(\mathbf{a}) (\mathbf{x} - \mathbf{a}) \quad (4.21)$$

Όπως είδαμε στην παράγραφο §4.4 το ελάχιστο του τετραγωνικού μοντέλου είναι

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{a} - \mathbf{G}^{-1}\mathbf{g} \quad (4.22)$$

Η ποσότητα $\delta = -\mathbf{G}^{-1}\mathbf{g}$ ονομάζεται *βήμα Newton*.

Αλγόριθμος Newton

Αρχικά δίνεται ένα σημείο εκκίνησης $\mathbf{x}^{(0)}$, και οι πρώτες και δεύτερες παράγωγοι $\mathbf{g}^{(0)}$ και $\mathbf{G}^{(0)}$. Κατόπιν για την επανάληψη k :

1. Επίλυση της εξίσωσης Newton $\mathbf{G}^{(k)}\delta^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)}$ για το $\delta^{(k)}$
2. Υπολογισμός του νέου σημείου $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \delta^{(k)}$

Η μέθοδος Newton συγκλίνει ταχύτατα στη λύση \mathbf{x}^* όταν το αρχικό σημείο $\mathbf{x}^{(0)}$ είναι στην περιοχή του \mathbf{x}^* όπου η προσέγγιση (4.21) ισχύει. Έχει όμως σοβαρά μειονεκτήματα έναντι των άλλων μεθόδων που περιγράφονται στη συνέχεια, που την καθιστούν απαγορευτική για πρακτικές εφαρμογές.

Κατ' αρχήν απαιτεί υπολογισμό του πίνακα των δευτέρων παραγώγων \mathbf{G} σε κάθε επανάληψη. Εάν ο χρήστης δεν μπορεί να παρέχει τον πίνακα \mathbf{G} σε αναλυτική μορφή, γεγονός σύνηθες για προβλήματα

μεγάλης διάστασης, τότε τα στοιχεία του θα πρέπει να προσεγγιστούν αριθμητικά. Επιπλέον για να βρεθεί το βήμα Newton απαιτείται η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος $N \times N$ σε κάθε επανάληψη.

Ένα όμως από τα πιο σοβαρά μειονεκτήματα της μεθόδου είναι ότι ο πίνακας $\mathbf{G}^{(k)}$ μπορεί να μην είναι θετικά ορισμένος, ειδικά αν το αρχικό σημείο βρίσκεται μακριά από το ελάχιστο. Ως αποτέλεσμα η μέθοδος μπορεί να μας οδηγήσει σε μέγιστο ή σε σαγματικό σημείο. Μια λύση για αυτό είναι η τροποποίηση του πίνακα $\mathbf{G}^{(k)}$ έτσι ώστε να γίνει θετικά ορισμένος. Αυτό επιτυγχάνεται προσθέτοντας ένα πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα στον $\mathbf{G}^{(k)}$, και κατόπιν επιλύοντας το γραμμικό σύστημα

$$(\mathbf{G}^{(k)} + \nu^{(k)} \mathbf{I}) \delta^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} \quad (4.23)$$

Η σταθερά $\nu^{(k)}$ πρέπει να επιλεγεί έτσι ώστε ο πίνακας $\mathbf{G}^{(k)} + \nu^{(k)} \mathbf{I}$ να είναι θετικά ορισμένος. Επιπλέον το βήμα 2 του αλγορίθμου αντικαθίσταται από γραμμική αναζήτηση στη διεύθυνση $\delta^{(k)} = -\mathbf{G}^{(k)-1} \mathbf{g}^{(k)}$ (διεύθυνση Newton) οπότε προκύπτει η μέθοδος Newton με γραμμική αναζήτηση.

4.11 Μέθοδοι quasi-Newton

Ακόμη και με τις διορθώσεις που κατά καιρούς έχουν προταθεί για τη μέθοδο Newton, το πρόβλημα του υπολογισμού του Εσσιανού πίνακα $\mathbf{G}^{(k)}$ σε κάθε επανάληψη παραμένει. Εάν ο χρήστης δεν μπορεί να παρέχει αναλυτικές σχέσεις για τον υπολογισμό του, τότε αυτός θα πρέπει να προσεγγισθεί με τη χρήση πεπερασμένων διαφορών, αυξάνοντας το υπολογιστικό κόστος κάθε επανάληψης. Αυτό καθώς και τα άλλα μειονεκτήματα της μεθόδου Newton αντιμετωπίζονται από μία πολύ πιο σημαντική κατηγορία μεθόδων, η ανακάλυψη των οποίων αύξησε σημαντικά τον αριθμό των προβλημάτων που μπορούν να αντιμετωπιστούν από τις αριθμητικές μεθόδους βελτιστοποίησης. Η βασική ιδέα στις μεθόδους quasi-Newton είναι να αποφύγουμε τον απευθείας υπολογισμό του \mathbf{G} προσεγγίζοντας τον πίνακα \mathbf{G} από ένα συμμετρικό, θετικά ορισμένο πίνακα \mathbf{B} , ο οποίος ενημερώνεται μετά από κάθε επανάληψη της μεθόδου. Με τον τρόπο αυτό αποφεύγουμε τον απευθείας υπολογισμό του \mathbf{G} .

Στην επανάληψη k της μεθόδου κατασκευάζουμε ένα τετραγωνικό μοντέλο της $f(\mathbf{x})$ χρησιμοποιώντας ένα συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα \mathbf{B}_k

$$q_k(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{B}_k \mathbf{p} + \mathbf{g}_k^T \mathbf{p} + f_k \quad (4.24)$$

Ο πίνακας \mathbf{B}_k αποτελεί μια προσέγγιση (όχι απαραίτητα καλή) του πίνακα των δευτέρων παραγώγων \mathbf{G}_k .

Οι παράγωγοι του $q_k(\mathbf{p})$ είναι:

$$\nabla q_k(\mathbf{p}) = \mathbf{B}_k \mathbf{p} + \mathbf{g}_k \quad (4.25)$$

Το ελάχιστο του $q_k(\mathbf{p})$ είναι

$$\mathbf{p}_k = -\mathbf{B}_k^{-1} \mathbf{g}_k \quad (4.26)$$

Παρατηρείστε ότι αν $\mathbf{B}_k = \mathbf{G}_k$, τότε το \mathbf{p}_k είναι το βήμα Newton.

Ακολουθεί γραμμική αναζήτηση στη διεύθυνση \mathbf{p}_k , δηλαδή βρίσκουμε το ελάχιστο ως προς α της συνάρτησης $\varphi(\alpha) = f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$. Το νέο σημείο είναι από το οποίο θα ξεκινήσει η επόμενη επανάληψη είναι $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$.

Στο νέο σημείο \mathbf{x}_{k+1} το τετραγωνικό μοντέλο είναι:

$$q_{k+1}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{B}_{k+1} \mathbf{p} + \mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{p} + f_{k+1} \quad (4.27)$$

Για να βρούμε τον \mathbf{B}_{k+1} απαιτούμε στο νέο σημείο \mathbf{x}_{k+1} οι παράγωγοι του νέου τετραγωνικού μοντέλου $q_{k+1}(\mathbf{p})$ να είναι ίσες με τις παραγώγους της συνάρτησης, δηλαδή

$$\nabla q_{k+1}(0) = \mathbf{g}_{k+1} \quad (4.28)$$

Αυτό όμως ισχύει από την κατασκευή του μοντέλου, αφού

$$\nabla q_{k+1}(\mathbf{p}) = \mathbf{B}_{k+1}\mathbf{p} + \mathbf{g}_{k+1} \Rightarrow \nabla q_{k+1}(\mathbf{0}) = \mathbf{g}_{k+1} \quad (4.29)$$

Επίσης απαιτούμε στο προηγούμενο σημείο \mathbf{x}_k οι παράγωγοι του νέου τετραγωνικού μοντέλου $q_{k+1}(\mathbf{p})$ να είναι ίσες με τις παραγώγους της συνάρτησης, δηλαδή

$$\nabla q_{k+1}(-\alpha_k \mathbf{p}_k) = \mathbf{g}_k \quad (4.30)$$

Όμως η παράγωγος του $q_{k+1}(\mathbf{p})$ είναι $\nabla q_{k+1}(\mathbf{p}) = \mathbf{B}_{k+1}\mathbf{p} + \mathbf{g}_k$. Συνεπώς η παραπάνω απαίτηση γράφεται

$$\mathbf{B}_{k+1}(\alpha_k \mathbf{p}_k) + \mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{g}_k \Rightarrow \mathbf{B}_{k+1}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k \quad (4.31)$$

Ονομάζουμε

$$\boldsymbol{\delta}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \quad (4.32)$$

$$\boldsymbol{\gamma}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k \quad (4.33)$$

οπότε η σχέση (4.31) γράφεται

$$\mathbf{B}_{k+1}\boldsymbol{\delta}_k = \boldsymbol{\gamma}_k \quad (4.34)$$

Η ανωτέρω σχέση ονομάζεται *εξίσωση τέμνουσας*. Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση τέμνουσας με $\boldsymbol{\delta}_k$ από αριστερά

$$\boldsymbol{\delta}_k^T \mathbf{B}_{k+1} \boldsymbol{\delta}_k = \boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k \quad (4.35)$$

Όμως αφού ο \mathbf{B}_{k+1} είναι θετικά ορισμένος, θα είναι $\boldsymbol{\delta}_k^T \mathbf{B}_{k+1} \boldsymbol{\delta}_k > 0$ και άρα

$$\boldsymbol{\delta}_k^T \boldsymbol{\gamma}_k > 0 \quad (4.36)$$

Η σχέση αυτή ονομάζεται *συνθήκη κυρτότητας*. Για να βρούμε τον \mathbf{B}_{k+1} απαιτούμε να είναι “κοντά” στον \mathbf{B}_k , δηλαδή

$$\min_B \|\mathbf{B} - \mathbf{B}_k\| \quad (4.37)$$

υπό τις συνθήκες $\mathbf{B} = \mathbf{B}^T$ και $\mathbf{B}\boldsymbol{\delta}_k = \boldsymbol{\gamma}_k$. Χρησιμοποιώντας τη σταθμισμένη νόρμα Frobenius οι Davidon, Fletcher και Powell ανεξάρτητα, βρήκαν τη σχέση:

$$\mathbf{B}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \right) \mathbf{B}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\gamma}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \right) + \frac{\boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\gamma}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \quad \text{Μέθοδος DFP} \quad (4.38)$$

Ο τύπος ενημέρωσης DFP είναι πολύ αποτελεσματικός, αλλά σύντομα αντικαταστάθηκε από ένα τύπο που ανακαλύφθηκε από τους Broyden, Fletcher, Goldfarb και Shanno και είναι γνωστός ως μέθοδος BFGS. Η μέθοδος BFGS θεωρείται η πιο αποτελεσματική από όλες τις μεθόδους quasi-Newton και χρησιμοποιεί τον πίνακα $\mathbf{H} = \mathbf{B}^{-1}$. Εφαρμόζοντας στον πίνακα \mathbf{H} συλλογισμούς παρόμοιους με αυτούς που οδήγησαν στον τύπο DFP, βρίσκουμε

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\gamma}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \right) \mathbf{H}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\gamma}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \right) + \frac{\boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\delta}_k^T}{\boldsymbol{\gamma}_k^T \boldsymbol{\delta}_k} \quad \text{Μέθοδος BFGS} \quad (4.39)$$

Ο αλγόριθμος έχει ως εξής: Αρχικά δίνεται ένα σημείο εκκίνησης \mathbf{x}_0 , οι πρώτες παράγωγοι της συνάρτησης \mathbf{g}_0 και ένας θετικά ορισμένος πίνακας \mathbf{H}_0 . Συνηθισμένες επιλογές για τον \mathbf{H}_0 είναι $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$ και $\mathbf{H}_0 = \mathbf{G}_0^{-1}$. Κατόπιν για την επανάληψη k :

1. Υπολογισμός της διεύθυνσης $\mathbf{p}_k = -\mathbf{H}_k \mathbf{g}_k$
2. Γραμμική αναζήτηση στη διεύθυνση \mathbf{p}_k , η οποία δίνει το επόμενο σημείο $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
3. Ενημέρωση του \mathbf{H}_k που δίνει τον \mathbf{H}_{k+1}

Το πιο ενδιαφέρον σημείο της μεθόδου, βρίσκεται στον τρόπο ενημέρωσης του \mathbf{H}_k στο βήμα 3. Αντιπροσωπεύει μια προσπάθεια να προστεθεί στον \mathbf{H}_k πληροφορία από τις δεύτερες παραγώγους, η οποία αποκτάται στην επανάληψη k .

4.12 Μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων

Οι μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων είναι ιδιαίτερα σημαντικές διότι είναι πιθανώς οι μόνες εφαρμόσιμες σε προβλήματα ελαχιστοποίησης όπου ο αριθμός των μεταβλητών είναι πολύ μεγάλος, αφού απαιτείται να αποθηκευτούν μόνο μερικοί μονοδιάστατοι πίνακες. Οι πρώτες μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων παρουσιάστηκαν το 1964 και βασίζονταν απευθείας σε ήδη γνωστές μεθόδους συζυγών διευθύνσεων για επίλυση γραμμικών συστημάτων της μορφής $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, όπου ο πίνακας \mathbf{A} είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Αυτό είναι ισοδύναμο με την ελαχιστοποίηση της τετραγωνικής συνάρτησης $\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$. Ξεκινώντας από την αρχική διεύθυνση $\mathbf{s}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$, οι μέθοδοι συζυγών διευθύνσεων δημιουργούν τις διευθύνσεις

$$\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} + \beta^{(k)} \mathbf{s}^{(k-1)} \quad \text{για } k > 0 \quad (4.40)$$

Για μη τετραγωνικές συναρτήσεις χρησιμοποιείται γραμμική αναζήτηση κατά μήκος της διεύθυνσης $\mathbf{s}^{(k)}$. Ο αλγόριθμος έχει ως εξής: Αρχικά δίνεται ένα σημείο εκκίνησης $\mathbf{x}^{(0)}$, οι πρώτες παράγωγοι της συνάρτησης $\mathbf{g}^{(0)}$ και ως πρώτη διεύθυνση αναζήτησης τίθεται $\mathbf{s}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$. Κατόπιν για την επανάληψη k :

1. Γραμμική αναζήτηση στη διεύθυνση $\mathbf{s}^{(k)}$ που δίνει $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{s}^{(k)}$
2. Υπολογισμός της νέας διεύθυνσης $\mathbf{s}^{(k+1)} = -\mathbf{g}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} \mathbf{s}^{(k)}$

όπου το $\beta^{(k)}$ δίνεται από τον τύπο των Fletcher και Reeves

$$\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\mathbf{g}^{(k+1)T} \mathbf{g}^{(k+1)}}{\mathbf{g}^{(k)T} \mathbf{g}^{(k)}} \quad (4.41)$$

Μπορεί να αποδειχθεί ότι για μια τετραγωνική συνάρτηση η μέθοδος Fletcher–Reeves τερματίζει το πολύ σε N επαναλήψεις. Σε κάθε επανάληψη της μεθόδου οι διευθύνσεις $\mathbf{s}^{(k)}$ που παράγονται είναι συζυγείς ως προς τις προηγούμενες, δηλαδή τέτοιες ώστε

$$\mathbf{s}^{(i)T} \mathbf{G} \mathbf{s}^{(j)} = 0 \quad \text{για } 0 \leq i \leq N-1 \quad \text{και } 0 \leq j \leq i-1 \quad (4.42)$$

Επιπλέον, οι πρώτες παράγωγοι είναι ορθογώνιες, δηλαδή

$$\mathbf{g}^{(i)T} \mathbf{g}^{(j)} = 0 \quad \text{για } 0 \leq i \leq N-1 \quad \text{και } 0 \leq j \leq i-1 \quad (4.43)$$

και οι διευθύνσεις $\mathbf{s}^{(k)}$ είναι φθίνουσες διευθύνσεις.

$$\mathbf{s}^{(i)T} \mathbf{g}^{(i)} = -\mathbf{g}^{(i)T} \mathbf{g}^{(i)} < 0 \quad (4.44)$$

Η πιο ενδιαφέρουσα ερώτηση πιθανώς είναι ποια από τις πολλές εναλλακτικές σχέσεις για το $\beta^{(k)}$ πρέπει να χρησιμοποιήσει κανείς. Αναφέρουμε τον εξίσου διαδεδομένο τύπο των Polak και Ribiere

$$\beta_{PR}^{(k)} = \frac{(\mathbf{g}^{(k+1)} - \mathbf{g}^{(k)})^T \mathbf{g}^{(k+1)}}{\mathbf{g}^{(k)T} \mathbf{g}^{(k)}} \quad (4.45)$$

Στην πράξη η μέθοδος Fletcher–Reeves απαιτεί την αποθήκευση ενός διανύσματος λιγότερο. Όμως υπολογιστικές μελέτες δείχνουν ότι η μέθοδος Polak–Ribiere έχει καλύτερη απόδοση, γεγονός που δεν έχει εξηγηθεί ακόμη θεωρητικά. Υπάρχουν πολλές άλλες δυνατότητες για το $\beta^{(k)}$ καθώς και παραλλαγές της μεθόδου.

4.13 Μέθοδοι διαστημάτων εμπιστοσύνης

Οι μέθοδοι διαστημάτων εμπιστοσύνης είναι η δεύτερη βασική κατηγορία μεθόδων, όπως αναφέρθηκε στην §4.5. Η βασική διαφορά μεταξύ μιας μεθόδου διαστημάτων εμπιστοσύνης, από μία μέθοδο που χρησιμοποιεί γραμμική αναζήτηση είναι ο τρόπος με τον οποίο αξιοποιείται η τετραγωνική προσέγγιση, έτσι ώστε να καθοριστεί το βήμα που θα δώσει το νέο σημείο. Στις μεθόδους γραμμικής αναζήτησης, το τετραγωνικό μοντέλο χρησιμοποιείται έτσι ώστε να καθοριστεί η διεύθυνση αναζήτησης $s^{(k)}$ και κατόπιν προσδιορίζεται το μήκος του βήματος κατά μήκος της $s^{(k)}$. Η διαδικασία αυτή για την επιλογή του βήματος δεν χρησιμοποιεί περαιτέρω την πληροφορία από την προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα. Οι μέθοδοι διαστημάτων εμπιστοσύνης χρησιμοποιούν μια διαφορετική φιλοσοφία. Αρχικά επιλέγεται ένα μέγιστο μήκος βήματος Δ και κατόπιν χρησιμοποιείται το τετραγωνικό μοντέλο για να επιλεγεί το καλύτερο δυνατό βήμα με μήκος το πολύ Δ , λύνοντας προσεγγιστικά το πρόβλημα

$$\begin{array}{ll} \text{Εύρεση ελαχίστου της συνάρτησης} & q(\mathbf{x} + \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{g}^T \mathbf{s} + \frac{1}{2} \mathbf{s}^T \mathbf{G} \mathbf{s} \\ \text{υπό τον περιορισμό} & \|\mathbf{s}\| \leq \Delta \end{array} \quad (4.46)$$

Το διάστημα Δ θεωρείται ως μία προσέγγιση, του πόσο μακριά εμπιστευόμαστε το τετραγωνικό μοντέλο και ονομάζεται διάστημα εμπιστοσύνης. Για μικρές τιμές του Δ , το βήμα είναι σχεδόν το βήμα της πιο απότομης καθόδου ενώ καθώς το Δ μεγαλώνει, το βήμα πλησιάζει και τελικά γίνεται ίσο με το βήμα Newton $\mathbf{s} = -\mathbf{G}^{-1} \mathbf{g}$.

Στην πράξη η απόδοση των μεθόδων διαστημάτων εμπιστοσύνης είναι συγκρίσιμη με τις μεθόδους που χρησιμοποιούν γραμμική αναζήτηση. Και οι δύο κατηγορίες μεθόδων χρησιμοποιούνται στο σύγχρονο λογισμικό και σε υπολογιστικές μελέτες δεν φαίνεται καμία να υπερτερεί σε απόδοση η ευρωστία, συστηματικά.

4.14 Αθροίσματα τετραγώνων – Μη γραμμικές εξισώσεις

Σε πολλές περιπτώσεις, όπως σε προβλήματα προσαρμογής δεδομένων και επίλυση συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων, η αντικειμενική συνάρτηση έχει τη μορφή:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M r_i^2(\mathbf{x})$$

ή σε μορφή πίνακα

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{r}^T \mathbf{r}$$

όπου το \mathbf{r} είναι διάνυσμα M θέσεων και τα στοιχεία του r_i ονομάζονται *υπόλοιπα*.. Οι πρώτες παράγωγοι της συνάρτησης δίνονται από:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^M \frac{\partial r_i}{\partial x_k} r_i = \sum_{i=1}^M J_{ki} r_i$$

ή σε μορφή πινάκων:

$$\mathbf{g} = \mathbf{J}^T \mathbf{r}$$

Ο \mathbf{J} είναι πίνακας $M \times N$, ονομάζεται Ιακωβιανός πίνακας και έχει στοιχεία $J_{ik} = \frac{\partial r_i}{\partial x_k}$.

Ο πίνακας των δευτέρων παραγώγων είναι:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k \partial x_l} = \sum_{i=1}^M \left[\frac{\partial^2 r_i}{\partial x_k \partial x_l} r_i + \frac{\partial r_i}{\partial x_k} \frac{\partial r_i}{\partial x_l} \right]$$

ή σε μορφή πινάκων:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k \partial x_l} = \sum_{i=1}^M r_i \nabla^2 r_i + \mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (4.47)$$

Διακρίνουμε δύο κατηγορίες προβλημάτων:

- *Προβλήματα μικρών υπολοίπων*
Σε αυτή την περίπτωση $r_i(\mathbf{x}^*) \approx 0$. Τότε μπορούμε να προσεγγίσουμε τον Εσσιανό πίνακα ως $\mathbf{G} \approx \mathbf{J}^T \mathbf{J}$
- *Προβλήματα μεγάλων υπολοίπων*
Εδώ $|r_i(\mathbf{x}^*)| \gg 0$ και η ανωτέρω προσέγγιση δεν είναι καλή.

4.14.1 Μέθοδος Gauss–Newton

Αν υποθέσουμε ότι τα υπόλοιπα r_i είναι μικρά, τότε μπορούμε χρησιμοποιώντας την (4.47) να προσεγγίσουμε τον Εσσιανό πίνακα ως $\mathbf{G} \approx \mathbf{J}^T \mathbf{J}$. Εάν εφαρμόσουμε τη μέθοδο Newton χρησιμοποιώντας αυτή την προσέγγιση για τον Εσσιανό πίνακα, παίρνουμε τη μέθοδο Gauss–Newton.

Αλγόριθμος Gauss–Newton

Δίδεται αρχικό σημείο $\mathbf{x}^{(0)}$.

Επανάληψη για $k = 1, 2, \dots$

1. Επίλυση του συστήματος $\mathbf{G}^{(k)} \boldsymbol{\delta}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} \rightarrow \mathbf{J}^{(k)T} \mathbf{J}^{(k)} \boldsymbol{\delta}^{(k)} = -\mathbf{J}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}$
2. Υπολογισμός του νέου σημείου $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}$.

Η μέθοδος Gauss–Newton δεν είναι πάντα ικανοποιητική, ιδιαίτερα όταν τα υπόλοιπα r_i είναι αρκετά μεγάλα. Για το λόγο αυτό η μέθοδος χρησιμοποιείται πάντα με χρήση γραμμικής αναζήτησης στη διεύθυνση $\boldsymbol{\delta}^{(k)}$.

Κεφάλαιο 5

Αριθμητική προσέγγιση παραγώγων

5.1 Εισαγωγή

Το πρόβλημα της αριθμητικής εκτίμησης των παραγώγων μιας συνάρτησης εμφανίζεται σε εφαρμογές όπως η βελτιστοποίηση και η επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Εδώ θα ασχοληθούμε κατά κύριο λόγο με προσεγγίσεις της πρώτης και δεύτερης παραγώγου συναρτήσεων μιας μεταβλητής $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$. Σημειώστε ότι σε πολλές περιπτώσεις η συνάρτηση f δεν έχει μια γνωστή αναλυτική μορφή, αλλά είναι αποτέλεσμα άλλων αριθμητικών υπολογισμών.

Μια πρώτη προσέγγιση στο πρόβλημα προκύπτει αν κανείς χρησιμοποιήσει τον ορισμό της παραγώγου

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

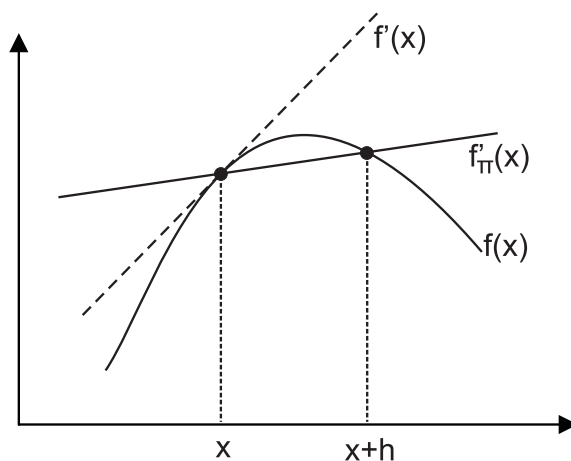
και επιλέξει ένα αρκετά μικρό βήμα παραγώγισης $h > 0$, οπότε προκύπτει η προσεγγιστική τιμή

$$f'_\pi(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (5.1)$$

Η σχέση (5.1) ονομάζεται *τύπος εμπρόσθιας διαφοράς*. Το σχήμα 5.1 δείχνει μια γεωμετρική ερμηνεία του τύπου εμπρόσθιας διαφοράς.

Παράδειγμα:

Έστω $f(x) = e^x$, οπότε $f'(x) = e^x$. Θέλουμε να υπολογίσουμε αριθμητικά την τιμή της παραγώγου στο σημείο $x = 2$, στο οποίο η ακριβής τιμή είναι $f'(2) = e^2 = 7.389056$ (υποθέτουμε ΗΥ με ακρίβεια $\varepsilon \approx 10^{-7}$).



Σχήμα 5.1: Γεωμετρική ερμηνεία του τύπου εμπρόσθιας διαφοράς.

Αν χρησιμοποιήσουμε $h = 0.1$ παίρνουμε

$$f'_\pi(x) = \frac{e^{2+0.1} - e^2}{0.1} = 7.771138$$

που απέχει από την πραγματική τιμή 0.382082.

Αν χρησιμοποιήσουμε μικρότερο βήμα $h = 0.01$ παίρνουμε

$$f'_\pi(x) = \frac{e^{2+0.01} - e^2}{0.01} = 7.426125$$

που απέχει από την πραγματική τιμή 0.037069.

Παρατηρείστε ότι μικρότερη τιμή του h δίνει καλύτερη προσέγγιση για την παράγωγο. Μπορούμε όμως να επιλέξουμε όσο μικρό h θέλουμε ; Η απάντηση είναι προφανώς όχι, αφού λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας του ΗΥ, για πολύ μικρές τιμές του h , θα είναι $fl(x+h) = fl(x)$. Πχ. αν επιλέγαμε $h = 10^{-20}$ σε μηχανή με $\varepsilon = 10^{-7}$ τότε $fl(2 + 10^{-20}) = fl(2)$ και θα προέκυπτε $f'_\pi(2) = 0$. Ποιο είναι το βέλτιστο h έτσι ώστε χρησιμοποιώντας τον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς (5.1) να έχουμε το μικρότερο δυνατό σφάλμα ; Για να απαντήσουμε στο ερώτημα αυτό θα πρέπει να εξετάσουμε τις δύο πηγές σφάλματος στη σχέση (5.1) που είναι το σφάλμα αποκοπής και το σφάλμα στρογγύλευσης.

5.2 Σειρά Taylor

Το ανάπτυγμα μιας συνάρτησης σε σειρά Taylor γύρω από ένα σημείο αποτελεί ένα χρήσιμο εργαλείο για την εκτίμηση των σφαλμάτων αποκοπής. Έτσι αν η συνάρτηση $f(x)$ και οι παράγωγοί της είναι συνεχείς τότε ανάπτυγμα Taylor της $f(x)$ γύρω από το σημείο x_0 είναι

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x-x_0)^k}{k!} f^{(k)}(x_0) \\ &= f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \frac{(x-x_0)^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \dots \end{aligned} \quad (5.2)$$

Θέτοντας $h = x - x_0$ η σειρά μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x) \\ &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x) + \dots \end{aligned}$$

Εάν κρατήσουμε μόνο τους n πρώτους όρους παίρνουμε

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^n \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x) + R_n \quad (5.3)$$

Το υπόλοιπο R_n μπορεί να γραφεί ως (μορφή Lagrange)

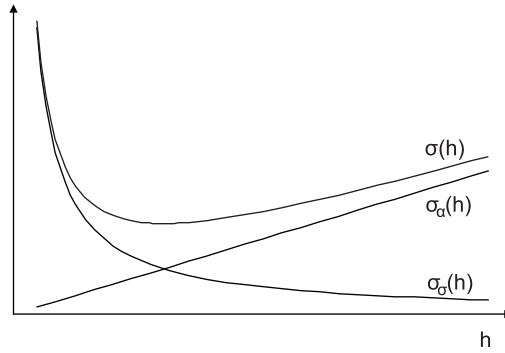
$$R_n = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad x < \xi < x+h$$

5.3 Τύποι εμπρόσθιας/οπίσθιας διαφοράς

5.3.1 Σφάλμα αποκοπής στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς

Ο τύπος εμπρόσθιας διαφοράς προκύπτει κρατώντας τους δύο πρώτους όρους στο ανάπτυγμα Taylor (5.3) οπότε παίρνουμε

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



Σχήμα 5.2: Τα σφάλματα που υπεισέρχονται στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς.

από όπου προκύπτει

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi)$$

Αν ονομάσουμε το σφάλμα αποκοπής $\sigma_\alpha(h) = hf''(\xi)/2$, τότε μπορούμε να γράψουμε

$$f'_\pi(x) = f'(x) + \sigma_\alpha(h)$$

Παρατηρείστε ότι το σφάλμα αποκοπής $\sigma_\alpha(h)$ είναι ανάλογο του βήματος παραγωγίσις h .

5.3.2 Σφάλμα λόγω πεπερασμένης ακρίβειας στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς

Εκτός από το σφάλμα αποκοπής, μια επιπλέον πηγή σφάλματος στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς (5.1) προκύπτει από τα σφάλματα στρογγύλευσης λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας υπολογισμών σε κάθε ΗΥ. Έτσι αν θεωρήσουμε ότι στη σχέση (5.1) το σφάλμα της αφαίρεσης και της διαίρεσης είναι αμελητέο, τότε η βασική πηγή σφαλμάτων στρογγύλευσης είναι ο υπολογισμός των $f(x+h)$ και $f(x)$. Υποθέτουμε ότι το σχετικό σφάλμα υπολογισμού των $f(x)$ και $f(x+h)$ είναι η , δηλαδή

$$\left| \frac{fl(f(x)) - f(x)}{f(x)} \right| = \eta$$

Για απλές συναρτήσεις μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το σχετικό σφάλμα είναι περίπου ίδιο με την ακρίβεια της μηχανής, δηλαδή $\eta \approx \varepsilon$, οπότε

$$\begin{aligned} fl(f'_\pi(x)) &= \frac{f(x+h)(1+\varepsilon) - f(x)(1+\varepsilon)}{h} \\ &= f'_\pi(x) + \frac{\varepsilon}{h}(f(x+h) - f(x)) \end{aligned}$$

Ένα άνω όριο $\sigma_\sigma(h)$ για το σφάλμα στρογγύλευσης προκύπτει ως:

$$|fl(f'_\pi(x)) - f'_\pi(x)| = \frac{\varepsilon}{h}|f(x+h) - f(x)| \leq \frac{\varepsilon}{h}(|f(x+h)| + |f(x)|) \leq \frac{2\varepsilon}{h}\tilde{f} \quad (5.4)$$

όπου \tilde{f} είναι η μέγιστη τιμή της $|f(x)|$ στο διάστημα $[x, x+h]$. Συνεπώς $\sigma_\sigma(h) = 2\varepsilon\tilde{f}/h$. Χάρην απλοστευσης δεχτήκαμε ότι ο υπολογισμός της f στα σημεία x και $x+h$ παρουσιάζει το ίδιο σχετικό σφάλμα. Παρατηρείστε εδώ ότι το $\sigma_\sigma(h)$ είναι αντιστρόφως ανάλογο του h .

5.3.3 Επιλογή του κατάλληλου βήματος

Ένα άνω φράγμα $\sigma(h)$ για το συνολικό σφάλμα προκύπτει ως εξής:

$$|\sigma_\alpha(h) + \sigma_\sigma(h)| \leq |\sigma_\alpha(h)| + |\sigma_\sigma(h)| = \frac{h}{2}|f''(\xi)| + \frac{2\varepsilon}{h}\tilde{f}$$

Το σχήμα 5.2 δείχνει τις τιμές των $\sigma_\alpha(h)$, $\sigma_\sigma(h)$ και $\sigma(h)$ σαν συνάρτηση του h . Το κατάλληλο βήμα παραγωγίσης προκύπτει ελαχιστοποιώντας ως προς h την τιμή του $\sigma(h)$

$$\min_h \left(\frac{h}{2} |f''(\xi)| + \frac{2\varepsilon}{h} \tilde{f} \right)$$

από όπου προκύπτει

$$h = \sqrt{\frac{4\tilde{f}}{|f''(\xi)|}} \varepsilon \quad (5.5)$$

Συνάγουμε έτσι ότι $h \propto \sqrt{\varepsilon}$. Δεδομένου ότι οι $f''(\xi)$ και \tilde{f} δεν είναι γνωστές, το βήμα παραγωγίσης δεν μπορεί να εκτιμηθεί απευθείας από τη σχέση (5.5). Παρατηρείστε όμως ότι για τους λόγους που αναφέρονται στην εισαγωγή, το h δεν μπορεί να είναι ανεξάρτητο του x . Μια εκτίμηση για το h λαμβάνεται ως εξής: Σε μια μικρή περιοχή γύρω από το σημείο στο οποίο ζητείται η παράγωγος, όπως φαίνεται και από τη σειρά Taylor (5.2), η συνάρτηση μπορεί να προσεγγιστεί από ένα πολυώνυμο $P_m(x)$ βαθμού m ,

$$f(x) \approx P_m(x) = \sum_{k=0}^m a_k x^k \quad (5.6)$$

όπου a_i , $i = 0, 1, 2, \dots, m$ είναι οι συντελεστές του πολυωνύμου (και τους οποίους βεβαίως δεν γνωρίζουμε ακριβώς). Τότε $Q_{m-2}(x) = P_m''(x)$ είναι ένα πολυώνυμο τάξης $m - 2$. Συνεπώς $f(x)/f''(x) \approx P_m(x)/Q_{m-2}(x) \propto x^2$. Έτσι στην πράξη χρησιμοποιείται $h = |x|\sqrt{\varepsilon}$. Η επιλογή αυτή είναι ικανοποιεί και την επιθυμητή ιδιότητα $f(x+h) \neq f(x)$

Κατ' αντιστοιχία με τον τύπο εμπρόσθιων διαφορών υπάρχει ο τύπος οπίσθιων διαφορών

$$f'_\pi(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (5.7)$$

5.4 Κεντρικές διαφορές

Οι τύποι εμπρόσθιων (5.1) και οπίσθιων διαφορών (5.7) παρουσιάζουν σφάλμα αποκοπής πρώτης τάξης ως προς h , δηλαδή

$$f'_\pi(x) = f'(x) + O(h)$$

Είναι δυνατή η κατασκευή τύπων που παρουσιάζουν σφάλμα μεγαλύτερης τάξης ως προς h . Κρατώντας τους τρεις πρώτους όρους στη σειρά Taylor παίρνουμε:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f^{(3)}(\xi) \quad (5.8)$$

Αν θέσουμε στη σχέση (5.8) όπου h το $-h$, παίρνουμε

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6} f^{(3)}(\xi) \quad (5.9)$$

από τις σχέσεις (5.8) και (5.9) προκύπτει ότι

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) \quad (5.10)$$

Η προσέγγιση

$$f'_\pi(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (5.11)$$

ονομάζεται *τύπος κεντρικής διαφοράς*. Παρατηρείστε ότι εδώ το σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του h^2 .

Όπως και στην περίπτωση της εμπρόσθιας διαφοράς μπορεί κανείς να εκτιμήσει το σφάλμα στρογγυλευσης ως $\varepsilon \tilde{f}/h$. Η κατάλληλη τιμή για το βήμα παραγωγισισης h προκύπτει και πάλι ελαχιστοποιώντας ως προς h το συνολικό σφάλμα

$$\min_h \left(\frac{h^2}{6} |f^{(3)}(\xi)| + \frac{\varepsilon}{h} \tilde{f} \right)$$

από όπου προκύπτει ότι

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\tilde{f}}{f^{(3)}(\xi)}\varepsilon} \quad (5.12)$$

Με συλλογισμούς παρόμοιους με αυτούς για τον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς επιλέγουμε τελικά $h = |x| \sqrt[3]{\varepsilon}$.

5.5 Τύποι μεγαλύτερης ακρίβειας

Οι σχέσεις εμπρόσθιας (5.1) και κεντρικής διαφοράς (5.11) απαιτούν 2 αποτιμήσεις της συνάρτησης. Είναι δυνατή η κατασκευή τύπων με σφάλμα ανώτερης τάξης ως προς h χρησιμοποιώντας περισσότερες αποτιμήσεις της συνάρτησης. Ας δούμε πως εξάγεται ένας συμμετρικός τύπος σταθερού βήματος με σφάλμα αποκοπής $O(h^4)$.

Χρησιμοποιούμε το ανάπτυγμα Taylor στα σημεία $x+h$, $x-h$, $x+2h$, $x-2h$ κρατώντας τους όρους μέχρι h^4 .

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.13)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.14)$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{4h^2}{2}f''(x) + \frac{8h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{16h^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{32h^5}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.15)$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2hf'(x) + \frac{4h^2}{2}f''(x) - \frac{8h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{16h^4}{24}f^{(4)}(x) - \frac{32h^5}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.16)$$

Προκύπτει έτσι ένα σύστημα τεσσάρων εξισώσεων με τέσσερις αγνώστους (τις $f'(x)$, $f''(x)$, $f^{(3)}(x)$ και $f^{(4)}(x)$). Αφαιρώντας κατά μέλη τις (5.13), (5.14) και διαιρώντας με $2h$ προκύπτει

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.17)$$

Όμως $f'_{\pi(h)} = (f(x+h) - f(x-h))/(2h)$ είναι η προσέγγιση κεντρικής διαφοράς με βήμα h , οπότε η (5.17) γράφεται

$$f'_{\pi(h)} = f'(x) + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.18)$$

Ομοίως αφαιρώντας κατά μέλη τις (5.15), (5.16) και διαιρώντας με $4h$ προκύπτει

$$\frac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h} = f'(x) + \frac{4h^2}{6}f^{(3)}(x) + \frac{16h^4}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.19)$$

Και εδώ όμως $f'_{\pi(2h)} = (f(x+2h) - f(x-2h))/(4h)$ είναι η προσέγγιση κεντρικής διαφοράς με βήμα $2h$, οπότε η (5.19) γράφεται

$$f'_{\pi(2h)} = f'(x) + \frac{4h^2}{6}f^{(3)}(x) + \frac{16h^4}{120}f^{(5)}(\xi) \quad (5.20)$$

Συνδυάζοντας τις (5.18) και (5.20) παίρνουμε

$$\frac{4f'_{\pi(h)} - f'_{\pi(2h)}}{3} = f'(x) - \frac{h^4}{30}f^{(4)}(\xi)$$

Χρησιμοποιώντας συλλογισμούς αντίστοιχους με αυτούς της παραγράφου 5.3.3, το βέλτιστο βήμα παραγωγίσης προκύπτει ως $h = |x|\sqrt[5]{\varepsilon}$.

5.6 Επέκταση στο όριο του Richardson

Στην παράγραφο 5.4 για να εξάγουμε τον τύπο κεντρικών διαφορών κρατήσαμε στο ανάπτυγμα Taylor όρους μέχρι και 2 τάξης. Αν κανείς κρατήσει περισσότερους όρους

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x) + \dots \\ f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(x) + \dots \end{aligned}$$

προκύπτει η προσέγγιση κεντρικών διαφορών με βήμα h

$$f'_{\pi(h)} = f'(x) + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{120}f^{(5)}(x) + \dots$$

Παρατηρήστε ότι το σφάλμα είναι ένα πολυώνυμο ως προς h , όπου υπάρχουν μόνο άρτιες δυνάμεις. Μπορούμε λοιπόν να γράψουμε

$$f'_{\pi(h)} = f'(x) + a_2h^2 + a_4h^4 + \dots \quad (5.21)$$

όπου οι a_2, a_4 κλπ δεν εξαρτώνται από το h .

Εφαρμόζοντας την (5.21) με βήμα $2h$ παίρνουμε

$$f'_{\pi(2h)} = f'(x) + 4a_2h^2 + 16a_4h^4 + \dots \quad (5.22)$$

Συνδυάζοντας τις (5.21) και (5.22) μπορούμε να απαλείψουμε τον όρο που περιέχει h^2 και να πάρουμε μια προσέγγιση με σφάλμα αποκοπής τάξης h^4 .

$$D_{(h)} = \frac{4f'_{\pi(h)} - f'_{\pi(2h)}}{3} = f'(x) - 4a_4h^4 + \dots \quad (5.23)$$

Εφαρμόζοντας την (5.23) με βήμα $2h$, δηλαδή χρησιμοποιώντας τις προσεγγίσεις $D_{(h)}$ και $D_{(2h)}$ μπορούμε να απαλείψουμε τον όρο που περιέχει h^4 . Παρατηρήστε ότι δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε την ακριβή τιμή των συντελεστών a_i . Η διαδικασία αυτή είναι μια ειδική περίπτωση μιας πιο γενικής μεθόδου που ονομάζεται *επέκταση στο όριο του Richardson*.

5.7 Δεύτερες παράγωγοι

Ο απλούστερος συμμετρικός τύπος για προσέγγιση της $f''(x)$ προκύπτει χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor στα σημεία $x+h$ και $x-h$.

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi) \\ f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi) \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας τα δύο ανωτέρω ανάπτυγματα ώστε να απαλείψουμε τον όρο $hf'(x)$ προκύπτει η προσέγγιση για τη δεύτερη παράγωγο

$$f''_{\pi} = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} = f''(x) + \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \quad (5.24)$$

Το βέλτιστο βήμα παραγωγίσης $h = |x|\sqrt[4]{\varepsilon}$ προκύπτει όπως και στην παράγραφο 5.3.3.

Βιβλιογραφία

- [1] Murray W. Gill P. E. and Wright M. H. *Practical optimization*. Academic Press, London, 1981.
- [2] S. J. Wright J. Nocedal. *Numerical Optimization*. Springer, 1999.
- [3] Dennis J. E. jr and Schnabel R. B. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- [4] Wolfe M.A. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization*. Van Nostrand Reinhold Company Ltd., 1987.
- [5] Brent R. P. *Algorithms for minimization without derivatives*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs. New Jersey, 1973.
- [6] Fletcher R. *Practical methods of optimization, 2nd edition*. John Wiley, Chichester, 1989.