

Πρόλογος

Οι μέθοδοι βελτιστοποίησης εφαρμόζονται σήμερα σε πολλά επιστημονικά, τεχνολογικά και πρακτικά προβλήματα. Για παράδειγμα αναφέρουμε την διαχείριση αμοιβαίων κεφαλαίων (βελτιστοποίηση χαρτοφυλακίου), την μελέτη σύνθετων μορίων με την μέθοδο της “Μοριακής Μηχανικής” που ελαχιστοποιεί την δυναμική ενέργεια του μορίου, την προσαρμογή παραμετρικών μοντέλων σε δεδομένα, την εκπαίδευση “Νευρωνικών Δικτύων”, την ρύθμιση λειτουργίας εργοστασιακών μονάδων, την επίλυση συστημάτων αλγεβρικών και διαφορικών εξισώσεων κλπ. Υπάρχουν διάφορες κατηγορίες προβλημάτων και αντίστοιχα διάφορες κατηγορίες μεθόδων βελτιστοποίησης. Υπάρχουν περιπτώσεις όπου οι επιτρεπτές τιμές των παραμέτρων είναι διακριτές ή ακέραιες, άλλες όπου οι παράμετροι είναι συνεχείς μεταβλητές, μιστά προβλήματα όπου μερικές παράμετροι παίρνουν διακριτές και οι υπόλοιπες συνεχείς τιμές. Για προβλήματα βελτιστοποίησης συνεχών συναρτήσεων, επιπλέον συνθήκες όπως η ύπαρξη πρώτων ή και δεύτερων παραγώγων επιτρέπουν την ανάπτυξη αποτελεσματικών μεθόδων υψηλών επιδόσεων.

Σε πολλά προβλήματα απαιτείται η βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης όπου οι παράμετροι δεν είναι μεταξύ τους ανεξάρτητοι, αλλά συνδέονται μέσω κάποιων συναρτησιακών σχέσεων, ισοτήτων ή και ανισοτήτων. Οι σχέσεις αυτές ονομάζονται περιορισμοί και το αντίστοιχο πρόβλημα “Βελτιστοποίηση με περιορισμούς”. Το παρόν κείμενο πραγματεύεται την ανάλυση μεθόδων για προβλήματα συνεχών συναρτήσεων χωρίς ή με απλούς περιορισμούς. Τρεις κατηγορίες μεθόδων αναλύονται: χωρίς χρήση παραγώγων, με χρήση μόνο πρώτων και με χρήση πρώτων και δεύτερων παραγώγων. Για προβλήματα με περιορισμούς αναλύονται προσεγγίσεις που χρησιμοποιούν μεθόδους βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, με κατάλληλα τροποποιημένη την αντικειμενική (υπό ελαχιστοποίηση) συνάρτηση. Συγκεκριμένα μελετούνται οι μέθοδοι “τιμωρίας” (penalty) για ισοτικούς περιορισμούς και οι μέθοδοι “εμποδίων” (barrier) για ανισοτικούς περιορισμούς.

Δύο προβλήματα έχουν ξεχωριστό ρόλο. Το ένα είναι το πρόβλημα της βελτιστοποίησης σε μία διάσταση. Το άλλο είναι η βελτιστοποίηση μιας κυρτής τετραγωνικής συνάρτησης πολλών μεταβλητών. Τα προβλήματα αυτά επιλύονται με σχετική ευκολία, το μεν ένα διότι έχει μόνο μία παράμετρο να εντοπίσει το δε άλλο διότι ανάγεται στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος αλγεβρικών εξισώσεων. Και τα δύο εμφανίζονται ως επιμέρους προβλήματα κατά την επίλυση του γενικού προβλήματος της βελτιστοποίησης. Οι μέθοδοι που βασίζονται στην μονοδιάστατη ελαχιστοποίηση ονομάζονται “Μέθοδοι με γραμμική αναζήτηση”, ενώ οι μέθοδοι που βασίζονται στην βελτιστοποίηση κυρτών τετραγωνικών συναρτήσεων ονομάζονται “Μέθοδοι περιοχών εμπιστοσύνης”.

Η βελτιστοποίηση γνώρισε μεγάλη άνθηση με την ανάπτυξη και την διαθεσιμότητα ισχυρών υπολογιστικών συστημάτων. Τα περισσότερα προβλήματα βελτιστοποίησης δεν επιδέχονται αναλυτικές λύσεις. Οι μέθοδοι είναι αναγκαστικά αριθμητικές. Η ακρίβεια των λύσεων συνεπώς περιορίζεται από την ακρίβεια της “μηχανής” και τα αριθμητικά σφάλματα. Οι αριθμητικές μέθοδοι είναι συνυφασμένες με λογισμικό το οποίο εμπίπτει σε δύο γενικές κατηγορίες:

- Βιβλιοθήκες υποπρογραμμάτων βελτιστοποίησης
- Ολοκληρωμένα περιβάλλοντα βελτιστοποίησης

Οι βιβλιοθήκες είναι αρκετά ευέλικτες αλλά ο χρήστης πρέπει από το δικό του κυρίως πρόγραμμα να καλεί τα κατάλληλα υποπρογράμματα και πιθανώς να συνδυάσει δύο (ή και περισσότερες) μεθόδους και να διαχειριστεί τα ενδιάμεσα αποτελέσματα με δικό του κώδικα. Τα ολοκληρωμένα περιβάλλοντα απαιτούν από τον χρήστη μόνο την κωδικοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης, και προσφέρουν εύχρηστα εργαλεία διαχείρισης χωρίς την απαίτηση συγγραφής επιπλέον κώδικα. Τα ολοκληρωμένα περιβάλλοντα προτιμούνται όταν ο κύριος στόχος είναι η βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης. Αντίθετα οι βιβλιοθήκες προγραμμάτων προτιμούνται όταν η βελτιστοποίηση εμφανίζεται ως ένα επιμέρους πρόβλημα και δεν αποτελεί τον κύριο και αποκλειστικό στόχο του υπολογισμού.

Το παρόν βιβλίο προήλθε από τις σημειώσεις του εξαμηνιαίου μαθήματος επιλογής του Τμήματος Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων με τίτλο “Βελτιστοποίηση”, συνοδεύεται δε από το εγχειρίδιο του λογισμικού που χρησιμοποιείται στο εργαστήριο και αποτελεί σημαντικό και αναπόσπαστο μέρος του μαθήματος. Το λογισμικό εμπίπτει στην κατηγορία του ολοκληρωμένου περιβάλλοντος, έχει αναπτυχθεί στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων και φέρει το όνομα **Merlin**. Η ανάπτυξή του άρχισε το 1984 και έκτοτε προκύπτουν

τακτικά νέες εκδόσεις. Το λογισμικό διατίθεται ελεύθερα από τον δικτυακό τόπο: <http://merlin.cs.uoi.gr>.

Η μελέτη του πηγαίου κώδικα (σε ANSI Fortran-77) βοηθά στην κατανόηση των αλγορίθμων και των τεχνικών υλοποίησής τους. Η χρησιμοποίηση του λογισμικού για την επίλυση ενός προσεκτικά επιλεγμένου συνόλου ασκήσεων, προσφέρει σημαντική εμπειρία και βοηθά στο να αποκτηθεί μια αίσθηση για την συμπεριφορά των μεθόδων στις διάφορες κατηγορίες προβλημάτων.

Θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε θερμά όλους όσους έχουν συνδράμει στην ανάπτυξη του κειμένου, των ασκήσεων και του λογισμικού και να αναλάβουμε την ευθύνη των λαθών που αναμένεται να υπάρχουν.

Ιωάννινα, 26-04-2008

Ι. Η. Λαγαρής, Δ. Γ. Παπαγεωργίου, Κ. Βόγκλης

Περί των συγγραφέων

Περιεχόμενα

I	Θεωρία Βελτιστοποίησης	7
1	Εισαγωγή	9
1.1	Αναγκαίες συνθήκες	10
1.2	Ικανές συνθήκες	11
1.3	Τετραγωνικές συναρτήσεις	12
1.4	Γραμμική αναζήτηση	13
1.5	Αθροίσματα τετραγώνων	14
1.6	Προβλήματα με περιορισμούς	14
1.6.1	Μέθοδοι τιμωρίας	15
1.6.2	Μέθοδοι εμποδίων	17
1.7	Προβλήματα	18
2	Σύγκλιση	21
2.1	Σύγκλιση ακολουθιών	21
2.1.1	Παραδείγματα	22
2.2	Η μέθοδος Newton-Raphson	23
2.2.1	Σύγκλιση της μεθόδου Newton	24
2.3	Προβλήματα	25
3	Μέθοδοι σε μία διάσταση	29
3.1	Μονότροπες συναρτήσεις	30
3.1.1	Η μέθοδος της “Χρυσής Τομής”	30
3.1.2	Η μέθοδος Fibonacci	32
3.1.3	Μέθοδος παραβολικής παρεμβολής	33
3.1.4	Η μέθοδος της διχοτόμησης	33
3.2	Γραμμική Αναζήτηση	35
3.2.1	Armijo και οπισθοχώρηση	36
3.3	Προβλήματα	36

4	Ελαχιστοποίηση τετραγωνικών συναρτήσεων	45
4.1	Ακριβής επίλυση	46
4.2	Προσεγγιστική επίλυση	47
4.3	Προβλήματα	48
5	Μέθοδοι ελαχιστοποίησης	49
5.1	Άμεσες μέθοδοι	50
5.2	Μέθοδοι βασισμένες στο διάνυσμα κλίσης	50
5.2.1	Η μέθοδος της οξύτατης πτώσης	50
5.3	Προβλήματα	52
6	Τεχνικές λεπτομέρειες	53
6.1	Προσέγγιση παραγώγων	53
6.2	Παραγοντοποίηση πινάκων	55
6.2.1	Ανάλυση Cholesky	55
6.2.2	Παραγοντοποίηση QR	57
II	Λογισμικό Βελτιστοποίησης	61
7	Εισαγωγή	63

Μέρος Ι
Θεωρία Βελτιστοποίησης

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η βελτιστοποίηση είναι η επιστήμη του εντοπισμού των “βέλτιστων λύσεων” σε μια σειρά επιστημονικών και πρακτικών προβλημάτων που έχουν την κατάλληλη μαθηματική διατύπωση. Η βελτιστοποίηση όταν αφορά ποσότητες όπως π.χ. κέρδος, απόδοση κλπ, αντιστοιχεί σε μεγιστοποίηση, ενώ όταν αφορά ποσότητες όπως σφάλμα, έλλειμμα κλπ, αντιστοιχεί σε ελαχιστοποίηση. Στο σημείο όπου μια συνάρτηση $f(x)$ έχει μέγιστο, η συνάρτηση $-f(x)$ έχει ελάχιστο. Ισχύει δηλαδή ότι:

$$\max_x \{f(x)\} = -\min_x \{-f(x)\} \quad (1.1)$$

Το πρόβλημα της τοπικής ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, μπορεί να διατυπωθεί ως εξής:

Να ευρεθεί ένα σημείο $x^* \in R^{(n)}$ τέτοιο ώστε:

$$f(x^*) \leq f(x), \quad \forall x \in R^{(n)} \text{ με την ιδιότητα: } \|x - x^*\| < \epsilon \quad (1.2)$$

για κάποιο $\epsilon > 0$ οσονδήποτε μικρό.

Για τον εντοπισμό απομονωμένων ελαχίστων η διατύπωση είναι ελαφρά διαφορετική, ως εξής:

Να ευρεθεί ένα σημείο $x^* \in R^{(n)}$ τέτοιο ώστε:

$$f(x^*) < f(x), \quad \forall x \in R^{(n)} \text{ με την ιδιότητα: } \|x - x^*\| < \epsilon \quad (1.3)$$

για κάποιο $\epsilon > 0$ οσονδήποτε μικρό.

Το πρόβλημα της εύρεσης του καθολικού ελαχίστου μιας συνάρτησης χωρίς

περιορισμούς, παρότι πολύ πιο δύσκολο έχει απλούστερη διατύπωση:¹

$$f(x^*) < f(x), \quad \forall x \in R^{(n)} \quad (1.4)$$

Υπάρχουν πολλά και καλά βιβλία στο θέμα της βελτιστοποίησης. Ορισμένα από αυτά συστήνονται για περαιτέρω μελέτη, βλέπε π.χ. [Fl95, Ber95, GMW97, DS96, NW99].

1.1 Αναγκαίες συνθήκες

Οι αναγκαίες συνθήκες που επικρατούν στο σημείο του ελαχίστου και που προκύπτουν από τον ορισμό του ελαχίστου έχουν ως εξής:

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad (1.5)$$

$$\nabla^2 f(x^*) \geq 0 \quad (1.6)$$

Όπου η έννοια της σχέσης (1.6) είναι ότι ο Εσσιανός πίνακας G με στοιχεία $G_{ij} = \frac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_i \partial x_j}$ είναι θετικά ημιορισμένος.

Σημειώστε ότι

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = \lim_{a \rightarrow 0^+} \frac{f(x^* + ae_i) - f(x^*)}{a} \geq 0$$

συνεπεία της (1.2). (e_i είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση i). Όμως επίσης ισχύει ότι:

$$\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = \lim_{a \rightarrow 0^+} \frac{f(x^*) - f(x^* - ae_i)}{a} \leq 0$$

πάλι συνεπεία της (1.2). Συνεπάγεται εκ των ανωτέρω ότι $\frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} = 0$ και συνεπώς και η συνθήκη (1.5). Η συνθήκη αυτή ονομάζεται αναγκαία συνθήκη πρώτης τάξεως.

Επίσης σημειώστε ότι:

$$f(x^* + ah) = f(x^*) + \frac{a^2}{2} h^T G h + O(a^3)$$

¹ Το πρόβλημα της καθολικής βελτιστοποίησης αποτελεί ένα ξεχωριστό ερευνητικό πεδίο με τεράστιο ενδιαφέρον, είναι όμως πέραν του σκοπού αυτού του βιβλίου και δεν θα καλυφθεί στην συνέχεια.

Με απλή επεξεργασία, χρήση της (1.2) και παίρνοντας όρια έχουμε:

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{f(x^* + ah) - f(x^*)}{a^2} = \frac{1}{2} h^T G h + \lim_{a \rightarrow 0} O(a) = \frac{1}{2} h^T G h \geq 0$$

για οποιοδήποτε διάνυσμα $h \neq 0$, σχέση από την οποία απορρέει η αναγκαία συνθήκη δευτέρας τάξεως (1.6).

Τα σημεία y για τα οποία ισχύει $\nabla f(y) = 0$, ονομάζονται *ακρότατα* της f . Για όσα εξ' αυτών ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ημιορισμένος, αρνητικά ημιορισμένος, ή αόριστος, ονομάζονται αντίστοιχα *ελάχιστα*, *μέγιστα* ή *σαγμοειδή*.

1.2 Ικανές συνθήκες

Εάν το σημείο x^* πληροί τις συνθήκες:

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad (1.7)$$

$$\nabla^2 f(x^*) > 0 \quad (1.8)$$

τότε είναι απομονωμένο ελάχιστο. Όπου η έννοια της (1.8) είναι ότι ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ορισμένος.

Θεωρείστε την ανάπτυξη κατά Taylor:

$$f(x^* + h) = f(x^*) + h^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} h^T \nabla^2 f(x^*) h + O(\|h\|^3) \quad (1.9)$$

Ο Εσσιανός πίνακας είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, οπότε έχει πραγματικές ιδιοτιμές μεγαλύτερες του μηδενός. Εάν $\lambda_0 > 0$ είναι η ελαχίστη των ιδιοτιμών τότε ισχύει ότι:

$$\frac{h^T \nabla^2 f(x^*) h}{h^T h} \geq \lambda_0 > 0 \quad (1.10)$$

Εκ των (1.7), (1.9) και (1.10) συνάγεται ότι:

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{f(x^* + h) - f(x^*)}{\|h\|^2} \geq \frac{1}{2} \lambda_0 > 0 \quad (1.11)$$

και εξ' αυτής ότι $f(x^* + h) > f(x^*)$, για $\|h\|$ αρκούντως μικρού.

1.3 Τετραγωνικές συναρτήσεις

Οι τετραγωνικές συναρτήσεις παίζουν σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη μεθόδων ελαχιστοποίησης. Αυτό δεν είναι τυχαίο, αφού οι τρεις πρώτοι όροι της ανάπτυξης Taylor (βλέπε (1.9)) για την προσέγγιση μιας συνάρτησης γύρω από ένα σημείο, απαρτίζουν μια τετραγωνική συνάρτηση. Η γενική μορφή μιας τετραγωνικής συνάρτησης αποτελείται από τρεις όρους:

$$q(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + p^T x + c \quad (1.12)$$

όπου c πραγματική σταθερά, $x, p \in R^{(n)}$ και $Q \in R^{(n \times n)}$. Κάθε τετραγωνικός πίνακας Q μπορεί να γραφεί ως:

$$Q = \frac{Q + Q^T}{2} + \frac{Q - Q^T}{2}$$

όπου ο πρώτος όρος είναι ένας συμμετρικός πίνακας, και ο δεύτερος αντισυμμετρικός. Η συνεισφορά του αντισυμμετρικού όρου στην $q(x)$ είναι μηδενική διότι:

$$x^T (Q - Q^T)x = x^T Qx - x^T Q^T x = x^T (Qx) - (Qx)^T x = 0$$

και άρα στο εξής θα θεωρούμε ότι ο πίνακας Q είναι συμμετρικός. Η κλίση της τετραγωνικής συνάρτησης και ο Εσσιανός πίνακας δίδονται αντίστοιχα από τις παρακάτω εκφράσεις:

$$\nabla q(x) = Qx + p \quad (1.13)$$

$$\nabla^2 q(x) = Q \quad (1.14)$$

Εάν ο Q είναι θετικά ορισμένος, τότε το ακρότατο $x^* = -Q^{-1}p$ υπάρχει και είναι ελάχιστο. Από την (1.13) συνεπάγεται ότι:

$$\nabla q(x_2) - \nabla q(x_1) = Q(x_2 - x_1) \quad (1.15)$$

Η παραπάνω σχέση, όπου ο πίνακας Q συνδέει τη διαφορά των θέσεων με την διαφορά των κλίσεων, έχει παίξει σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη των μεθόδων “Μεταβλητής Μετρικής” γνωστές και ως “Quasi-Newton”.

1.4 Γραμμική αναζήτηση

Η εξίσωση που περιγράφει μια ευθεία στον R^n και που ορίζεται από δύο σημεία x_1, x_2 από τα οποία και περνά δίδεται από:

$$x(\lambda) = x_1 + \lambda(x_2 - x_1) \quad (1.16)$$

Επίσης η ευθεία που περνά από ένα σημείο x_1 και είναι παράλληλη προς ένα διάνυσμα s δίδεται παρομοίως από:

$$x(\lambda) = x_1 + \lambda s \quad (1.17)$$

Η διαδικασία

$$\min_{\lambda} f(x_1 + \lambda s) \quad (1.18)$$

ονομάζεται γραμμική αναζήτηση και ελαχιστοποιεί την $f(\cdot)$ κατά μήκος της ευθείας που περνά από το σημείο x_1 και είναι παράλληλη προς το διάνυσμα s . Αναπτύσσοντας κατά Taylor έχουμε:

$$f(x_1 + \lambda s) = f(x_1) + \lambda s^T \nabla f(x_1) + \frac{1}{2} \lambda^2 s^T \nabla^2 f(x_1) s + O(\lambda^3) \quad (1.19)$$

Η παράγωγος κατεύθυνσης ορίζεται ως:

$$\frac{d}{d\lambda} f(x_1 + \lambda s)|_{\lambda=0} = s^T \nabla f(x_1) \quad (1.20)$$

και είναι η παράγωγος της $f(\cdot)$ στο σημείο x_1 κατά μήκος της κατεύθυνσης s . Εάν η παράγωγος κατεύθυνσης είναι αρνητική, δηλαδή ισχύει

$$s^T \nabla f(x_1) < 0 \quad (1.21)$$

τότε η συνάρτηση στο σημείο x_1 είναι φθίνουσα κατά μήκος της s . Σε αυτή την περίπτωση η s ονομάζεται “φθίνουσα κατεύθυνση”.

Οι φθίνουσες κατευθύνσεις παίζουν σημαντικό ρόλο στις τεχνικές ελαχιστοποίησης και ο τρόπος επιλογής τους χαρακτηρίζει ουσιαστικά τις μεθόδους. Η κατεύθυνση

$$s = -\nabla f(x_1)$$

είναι φθίνουσα στο x_1 διότι

$$s^T \nabla f(x_1) = -\nabla f(x_1)^T \nabla f(x_1) < 0$$

Επίσης η κατεύθυνση $s = -H \nabla f(x_1)$, όπου $H \in R^{n \times n}$ είναι πίνακας συμμετρικός και θετικά ορισμένος, είναι φθίνουσα διότι

$$s^T \nabla f(x_1) = -\nabla f(x_1)^T H \nabla f(x_1) < 0$$

εξ' υποθέσεως.

1.5 Αθροίσματα τετραγώνων

Ένα από τα συχνά αντιμετωπιζόμενα προβλήματα είναι η προσαρμογή δεδομένων. Για παράδειγμα έστω ότι υπάρχει ένα σύνολο (t_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, M$ δεδομένων, και ένα κατάλληλο μοντέλο $f(t, x)$ με παραμέτρους x_1, x_2, \dots, x_n . Ζητείται να εντοπισθούν οι τιμές των παραμέτρων αυτών, έτσι ώστε η προσέγγιση $f(t_i, x) \approx y_i$ να είναι βέλτιστη στα επιτρεπόμενα από το μοντέλο πλαίσια. Αυτό ισοδυναμεί με την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης:

$$F(x) = \sum_{i=1}^M [f(t_i, x) - y_i]^2 \quad (1.22)$$

Παρατηρούμε ότι η ως άνω συνάρτηση έχει μια συγκεκριμένη δομή, είναι άθροισμα τετραγωνικών όρων. Οι συναρτήσεις με τέτοια δομή, επιτρέπουν την εφαρμογή ειδικών μεθόδων που πλεονεχτούν έναντι των μεθόδων “γενικής χρήσης”. Η κατηγορία αυτών των συναρτήσεων είναι σημαντική διότι πολλά πρακτικά προβλήματα (όπως η προσαρμογή δεδομένων, η εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων, κλπ) ανάγονται στην ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης τέτοιας μορφής και για αυτό το λόγο οι αντίστοιχες ειδικές μέθοδοι θα μελετηθούν εκτενώς.

1.6 Προβλήματα με περιορισμούς

Στην παρούσα παράγραφο θα ασχοληθούμε με το πως μέθοδοι που δεν λαμβάνουν υπόψη περιορισμούς, δύνανται να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση προβλημάτων με περιορισμούς. Οι περιορισμοί διακρίνονται σε δύο κατηγορίες, σε ισοτικούς όταν έχουν την μορφή εξισώσεων και ανισοτικούς όταν περιγράφονται από ανισώσεις. Η ιδέα είναι να ενσωματωθούν οι περιορισμοί στην αντικειμενική συνάρτηση έτσι ώστε να μετασχηματισθεί το αρχικό πρόβλημα με τους περιορισμούς σε ένα άλλο πρόβλημα χωρίς περιορισμούς. Οι ισοτικοί περιορισμοί αντιμετωπίζονται με μεθόδους “τιμωρίας” (penalty), οι δε ανισοτικοί με μεθόδους “τιμωρίας” αλλά και με μεθόδους “εμποδίων” (barrier). Τα σημεία του χώρου αναζήτησης όπως αυτός διαμορφώνεται από τους περιορισμούς ονομάζονται “εφικτά” σημεία. Οι μέθοδοι “τιμωρίας” χρησιμοποιούν σημεία είτε εφικτά είτε όχι, εν αντιθέσει με τις μεθόδους “εμποδίων” που χρησιμοποιούν μόνον εφικτά σημεία και για τον λόγο αυτό πολλές φορές αναφέρονται και ως “μέθοδοι εσωτερικών σημείων”.

1.6.1 Μέθοδοι τιμωρίας

Ισοτικοί περιορισμοί: Το πρόβλημα τίθεται ως:

$$\min\{f(x)\} \quad (1.23)$$

υπό τον περιορισμό: $c(x) = 0$

και αντιμετωπίζεται ως εξής:

Κατασκευάζεται η συνάρτηση [Cou43]

$$F(x, \lambda^{(k)}) = f(x) + \lambda^{(k)}c(x)^2 \quad (1.24)$$

που είναι το άθροισμα της αρχικής αντικειμενικής συνάρτησης και της συνάρτησης “τιμωρίας”². Η παράμετρος λ ονομάζεται παράμετρος τιμωρίας και διαλέγεται έτσι ώστε $0 < \lambda^{(k)} < \lambda^{(k+1)} \rightarrow \infty$.

Σε κάθε επανάληψη (k) ελαχιστοποιείται ως προς x η $F(x, \lambda^{(k)})$ και το αντίστοιχο ελάχιστο $x^{*(k)}$ χρησιμοποιείται ως αρχικό σημείο για την ελαχιστοποίηση της $F(x, \lambda^{(k+1)})$. Η διαδικασία αυτή μηδενίζει την $c(x)$, οπότε και θεωρούμε ότι το πρόβλημα λύθηκε.

Για παράδειγμα το πρόβλημα:

$$\min f(x) = x_1^2 + x_2^2, \quad \text{με } ax_1 + bx_2 = 1$$

μπορεί να λυθεί με αντικατάσταση:

$$x_2 = \frac{1 - ax_1}{b}, \quad \text{οπότε } f = x_1^2 + \left(\frac{1 - ax_1}{b}\right)^2$$

Τώρα η f είναι συνάρτηση μιάς μεταβλητής. Μηδενίζοντας την παράγωγο έχουμε:

$$x_1 = \frac{a}{a^2 + b^2} \quad \text{και} \quad x_2 = \frac{b}{a^2 + b^2}$$

Το πρόβλημα μπορεί επίσης να επιλυθεί με την μέθοδο τιμωρίας. Κατασκευάζουμε την συνάρτηση

$$F(x, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda(ax_1 + bx_2 - 1)^2$$

²Εάν υπάρχουν περισσότεροι του ενός περιορισμοί $c_i(x) = 0$, $i = 1, 2, \dots, M$, τότε η αντίστοιχη συνάρτηση τιμωρίας αλλάζει από $c(x)^2$ σε $c^T(x)c(x) \equiv \sum_{i=1}^M c_i(x)^2$

Μηδενίζοντας τις πρώτες μερικές παραγώγους και λύνοντας το προκύπτον γραμμικό σύστημα έχουμε:

$$x_1 = \frac{\lambda a}{1 + \lambda(a^2 + b^2)} \text{ και } x_2 = \frac{\lambda b}{1 + \lambda(a^2 + b^2)}$$

Θέτοντας $\lambda \rightarrow \infty$ παίρνουμε την προηγούμενη λύση.

Ειδική περίπτωση

Η ελαχιστοποίηση μιας κυρτής τετραγωνικής συνάρτησης $\frac{1}{2}x^T Qx + p^T x$ με έναν γραμμικό ισοτικό περιορισμό $c^T x = a$, επιδέχεται αναλυτική λύση που είναι δυνατόν να προκύψει δια της μεθόδου της τιμωρίας. Θέτουμε:

$$F(x, \lambda) = \frac{1}{2}x^T Qx + p^T x + \frac{1}{2}\lambda(c^T x - a)^2 \quad (1.25)$$

Μηδενίζοντας την κλίση έχουμε: $[Q + \lambda cc^T]x = -p + a\lambda c$. Αντιστρέφοντας τον πίνακα στις αγκύλες με την βοήθεια της σχέσης Sherman-Morrison-Woodbury³ λαμβάνουμε:

$$x^*(\lambda) = -Q^{-1}p + \frac{\lambda}{1 + \lambda c^T Q^{-1}c} (aQ^{-1}c + Q^{-1}cc^T Q^{-1}p)$$

και για $\lambda \rightarrow \infty$

$$x^* = -[Q^{-1} - \frac{Q^{-1}cc^T Q^{-1}}{c^T Q^{-1}c}]p + a \frac{Q^{-1}c}{c^T Q^{-1}c}$$

Ανισοτικοί περιορισμοί: Το πρόβλημα τίθεται ως:

$$\min\{f(x)\} \quad (1.26)$$

$$\text{υπό τον περιορισμό: } h(x) \geq 0$$

και αντιμετωπίζεται ως εξής:

Κατασκευάζεται η συνάρτηση

$$F(x, \lambda^{(k)}) = f(x) + \lambda^{(k)} \min\{0, h(x)\}^2 \quad (1.27)$$

και ακολουθείται η ίδια τακτική όπως και προηγουμένως.

³ $[A + uv^T]^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u}$ όπου $u, v \in R^{(n)}$ και $A \in R^{(n \times n)}$.

1.6.2 Μέθοδοι εμποδίων

Εναλλακτικά για τα προβλήματα που υπόκεινται σε ανισοτικούς περιορισμούς υπάρχουν οι μέθοδοι των “εμποδίων” που αντιμετωπίζουν το πρόβλημα [1.26] ως εξής:

1. Κατασκευάζεται είτε η συνάρτηση [Car61]

$$F(x, r^{(k)}) = f(x) + r^{(k)} \frac{1}{h(x)}$$

2. είτε η [Fri55]

$$F(x, r^{(k)}) = f(x) - r^{(k)} \ln(h(x))$$

που είναι το άθροισμα της αρχικής αντικειμενικής συνάρτησης και της συνάρτησης “εμποδίου”⁴, όπου $r^{(k)} > 0$ φθίνουσα ακολουθία τείνουσα στο μηδέν, $r^{(k)} \rightarrow 0$. Σημειώστε ότι το αρχικό σημείο πρέπει να είναι εφικτό και στην συνέχεια όλα τα σημεία παραμένουν εφικτά. Σε κάθε επανάληψη (k) ελαχιστοποιείται ως προς x η $F(x, r^{(k)})$ και το αντίστοιχο ελάχιστο $x^{*(k)}$ χρησιμοποιείται ως αρχικό σημείο για την ελαχιστοποίηση της $F(x, r^{(k+1)})$. Επίσης από την μιά επανάληψη στην επόμενη διοχετεύονται επιπλέον πληροφορίες, όπως π.χ. ο Εσσιανός πίνακας, η περιοχή εμπιστοσύνης, κλπ.

Το γενικό πρόβλημα με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς:

$$\min\{f(x)\} \tag{1.28}$$

$$\text{υπό : } c_i(x) = 0, \forall i = 1, \dots, M$$

$$\text{και : } h_i(x) \geq 0, \forall i = 1, \dots, K$$

αντιμετωπίζεται με συνδυασμό συναρτήσεων τιμωρίας ή και εμποδίων με απευθείας επέκταση των παραπάνω ιδεών.

⁴Εάν υπάρχουν περισσότεροι του ενός περιορισμοί $h_i(x) \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, K$, τότε η αντίστοιχη συνάρτηση εμποδίου αλλάζει είτε από $1/h(x)$ σε $\sum_{i=1}^K 1/h_i(x)$, είτε από $-\ln(h(x))$ σε $-\sum_{i=1}^K \ln(h_i(x))$

1.7 Προβλήματα

1. Έστω συμμετρικός $n \times n$ πραγματικός πίνακας S . Δείξτε ότι:
 - (a) Ο S έχει πραγματικές ιδιοτιμές.
 - (b) Εάν λ_0 η ελαχίστη των ιδιοτιμών του, τότε ισχύει

$$\forall x \in \mathbb{R}^n \quad \frac{x^T S x}{x^T x} \geq \lambda_0$$

2. Δίδεται η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = (x_1 - x_2^2)^2 + (x_1 - x_2)^2$.
 - (a) Εξετάστε εάν κάποια από τις κατευθύνσεις $s_1 = (2, 1)^T$, $s_2 = (1, 1)^T$ είναι φθίνουσα στο σημείο $x = (-1, 1)^T$.
 - (b) Δίδεται το σημείο $x_0 = (3, -1)^T$. Από το σημείο αυτό εφαρμόστε γραμμική αναζήτηση στην κατεύθυνση που είναι παράλληλη προς την $-\nabla f(x_0)$.
 - (c) Στο σημείο που κατέληξε η αναζήτηση, εξετάστε εάν ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ορισμένος.
 - (d) Αναπτύξτε την f σε σειρά Taylor γύρω από το σημείο $x = (-1, 1)^T$ και κρατήστε τους τρεις πρώτους όρους της σειράς που αποτελούν ένα τοπικό τετραγωνικό μοντέλο. Βρείτε το ελάχιστο του μοντέλου και συγκρίνατέ το με το ελάχιστο της f που είναι στο $x^* = (1, 1)^T$.
3. Αποδείξτε ότι ο πίνακας $B = \begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ είναι θετικά ορισμένος, χρησιμοποιώντας τον ορισμό: $x^T B x > 0$, $\forall x \neq 0$, όπου $x = (x_1, x_2)^T$.
4. Δίδονται ένα σημείο $p = (p_1, p_2)^T$ και η ευθεία $(\epsilon) : x_1 - x_2 = d$. Να ευρεθεί το σημείο x^* που ανήκει στην ευθεία (ϵ) και έχει την ελαχίστη απόσταση από το σημείο p .
5. Λογισμός μεταβολών.
Θεωρείστε το ολοκλήρωμα:

$$I[y] = \int_a^b F(x, y, y') dx$$

όπου $y = y(x)$, $y' = \frac{d}{dx}y(x)$. Ζητείται να ευρεθεί μια συνάρτηση $y^*(x)$ που να ικανοποιεί τις συνθήκες:

$$y^*(a) = y_1 \text{ και } y^*(b) = y_2 \quad (1.29)$$

τέτοια ώστε το ολοκλήρωμα $I[y^*]$ να είναι ελάχιστο. Η λύση του προβλήματος αυτού ανάγεται στην επίλυση των διαφορικών εξισώσεων “Euler-Lagrange” οι οποίες προκύπτουν από την εξής θεώρηση. Έστω ότι η λύση είναι η y^* και έστω $\eta(x)$ μια συνεχής συνάρτηση με $\eta(a) = \eta(b) = 0$. Τότε η συνάρτηση $y(x) = y^*(x) + \gamma\eta(x)$ είναι μια υποψήφια λύση. Θα πρέπει το ολοκλήρωμα

$$I[\gamma] = \int_a^b F(x, y^* + \gamma\eta, y^{*\prime} + \gamma\eta') dx$$

να έχει ελάχιστο στο $\gamma = 0$. Θα πρέπει δηλαδή να ισχύει: $\frac{d}{d\gamma}I[\gamma]|_{\gamma=0} = 0$. Δείξτε ότι έτσι προκύπτει η εξίσωση Euler-Lagrange :

$$\frac{\partial F}{\partial y^*} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y^{*\prime}} \right) = 0$$

Κεφάλαιο 2

Σύγκλιση

Για την μελέτη των μεθόδων ελαχιστοποίησης, η έννοια της σύγκλισης είναι κεφαλαιώδους σημασίας. Πότε μια μέθοδος συγκλίνει και πόσο γρήγορα συγκλίνει, είναι ερωτήσεις που θα μας απασχολήσουν στο παρόν κεφάλαιο. Επίσης θα μελετηθούν οι ιδιότητες σύγκλισης μιας σημαντικής μεθόδου επίλυσης μη-γραμμικών εξισώσεων σε μια διάσταση, της μεθόδου Newton, γνωστής και ως μεθόδου Newton-Raphson.

2.1 Σύγκλιση ακολουθιών

Έστω μια ακολουθία πραγματικών αριθμών: x_k , $k = 0, 1, 2, \dots$. Θα λέμε ότι η ακολουθία x_k συγκλίνει στο x^* όταν ισχύει

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |x_k - x^*| = 0$$

Εάν η ακολουθία x_k συγκλίνει στο x^* και υπάρχει μια σταθερά $c \in [0, 1)$ τέτοια ώστε να ισχύει

$$|x_{k+1} - x^*| \leq c|x_k - x^*|, \quad \forall k \geq k_0$$

όπου k_0 οιοσδήποτε πεπερασμένος θετικός ακέραιος, τότε λέμε ότι η ακολουθία x_k συγκλίνει q -γραμμικά στο x^* . Εάν εναλλακτικά ισχύει

$$|x_{k+1} - x^*| \leq c|x_k - x^*|^p$$

τότε λέμε ότι η ακολουθία x_k συγκλίνει στο x^* με q -τάξη ¹ τουλάχιστον p . Για $p = 2$ έχουμε q -τετραγωνική και για $p = 3$ q -κυβική σύγκλιση. Μια

¹Το πρόθεμα q προέρχεται από την λέξη quotient (=λόγος)

σημαντική τάξη σύγκλισης είναι η q -υπεργραμμική για την οποία ισχύει

$$|x_{k+1} - x^*| \leq c_k |x_k - x^*|$$

όπου c_k ακολουθία συγκλίνουσα στο μηδέν.

2.1.1 Παραδείγματα

Για να κατανοήσουμε την τάξη σύγκλισης θα μελετήσουμε μερικές χαρακτηριστικές περιπτώσεις.

1. q -γραμμική σύγκλιση

$$x_k = 1 + 2^{-k} \quad (2.1)$$

Συγκλίνει στο $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = 1$ οπότε έχουμε ότι:

$$\frac{|x_{k+1} - 1|}{|x_k - 1|} = \frac{2^{-(k+1)}}{2^{-k}} = \frac{1}{2}$$

2. q -υπεργραμμική σύγκλιση

$$x_k = \frac{x_{k-1}}{k-1} + 1 - \frac{1}{k-1}, \text{ με } x_1 = 1/2 \quad (2.2)$$

Συγκλίνει στο $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = 1$ οπότε έχουμε ότι:

$$\frac{|x_{k+1} - 1|}{|x_k - 1|} = \frac{|x_k/k - 1/k|}{|x_k - 1|} = \frac{1}{k} \rightarrow 0$$

3. q -τετραγωνική σύγκλιση

$$x_k = 1 + 2^{-2^k} \quad (2.3)$$

Συγκλίνει στο $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = 1$ οπότε έχουμε ότι:

$$\frac{|x_{k+1} - 1|}{|x_k - 1|^2} = \frac{2^{-2^{k+1}}}{(2^{-2^k})^2} = 1$$

Στον πίνακα 2.1 παρατίθενται οι τιμές των $|x_i - x^*|$ των 10 πρώτων επαναλήψεων για τις ακολουθίες (2.1), (2.2) και (2.3). Παρατηρούμε ότι η πιο αργή σύγκλιση είναι η q -γραμμική και η ταχύτερη η q -τετραγωνική. Αλγόριθμοι με q -γραμμική σύγκλιση αποφεύγονται στην πράξη ως αναποτελεσματικοί ².

²Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης θεωρούνται αποτελεσματικοί όταν επιτυγχάνουν q -υπεργραμμική, ή σύγκλιση υψηλότερης τάξης.

i	Ακ. (2.1)	Ακ. (2.2)	Ακ. (2.3)
1	0.5000000	0.5000000	0.2500000
2	0.2500000	0.5000000	0.0625000
3	0.1250000	0.2500000	0.0039063
4	0.0625000	0.0833333	0.000153
5	0.0312500	0.0208333	0.0000000
6	0.0156250	0.0041667	0.0000000
7	0.0078125	0.0006944	0.0000000
8	0.0039063	0.0000992	0.0000000
9	0.0019531	0.0000124	0.0000000
10	0.0009766	0.0000014	0.0000000

Πίνακας 2.1: Διαδοχικές τιμές $|x_i - x^*|$ για τις ακολουθίες (2.1), (2.2) και (2.3). Εύκολα συγκρίνονται οι ταχύτητες σύγκλισης.

2.2 Η μέθοδος Newton-Raphson

Η επίλυση μιας μη-γραμμικής εξίσωσης $f(x) = 0$, είναι ένα συχνά εμφανιζόμενο πρόβλημα και για τον λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί αρκετές αριθμητικές μέθοδοι για την αντιμετώπισή του. Όταν η παράγωγος της συνάρτησης $f'(x)$ υπάρχει και είναι συνεχής, τότε μία από τις πιο πετυχημένες μεθόδους είναι αυτή των Newton-Raphson. Η εν λόγω μέθοδος προσεγγίζει την συνάρτηση στην περιοχή ενός σημείου x_0 με ένα γραμμικό μοντέλο $L(x, x_0)$, που προκύπτει από την κατά Taylor ανάπτυξη:

$$f(x) \approx L(x, x_0) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0), \quad \text{για } x \text{ στην περιοχή του } x_0 \quad (2.4)$$

Λύνοντας την εξίσωση $L(x, x_0) = 0$, έχουμε μια προσέγγιση της ρίζας

$$\hat{x} = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται, με το \hat{x} να παίρνει την θέση του x_0 , έως ότου ικανοποιηθεί μια συνθήκη τερματισμού. Δύο είναι οι συνήθεις συνθήκες τερματισμού:

$$\text{είτε } |f(\hat{x})| \leq \epsilon \rightarrow 0, \text{ είτε } |\hat{x} - x_0| \leq \delta \rightarrow 0$$

Μια βήμα προς βήμα περιγραφή δίνεται από τον αλγόριθμο 2.2.1.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 2.2.1

Μέθοδος Newton-Raphson

1. Δεδομένων των x_0 και ενός μικρού $\epsilon > 0$
2. Υπολογίστε $f(x_0), f'(x_0)$
3. Εάν $|f(x_0)| \leq \epsilon$, το x_0 είναι ρίζα; ΤΕΛΟΣ.
4. Υπολογίστε $\hat{x} = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$
5. $x_0 \leftarrow \hat{x}$ και συνέχισε από το βήμα 2.

Μια υλοποίηση του ως άνω αλγορίθμου σε Fortran-77, παρατίθεται στον πίνακα 2.2 στην σελίδα 27. Στο παράδειγμα χρησιμοποιείται η συνάρτηση $f(x) = x^2 - 2$ με $f'(x) = 2x$. Η ρίζα είναι προφανώς $x_0 = \sqrt{2}$.

2.2.1 Σύγκλιση της μεθόδου Newton

Η μέθοδος Newton συγκλίνει υπό προϋποθέσεις και όπως θα δούμε η τάξη της σύγκλισης είναι q-τετραγωνική, χαρακτηριστικό πολύ επιθυμητό για τέτοιου είδους μεθόδους.

Μια συνάρτηση $g(x)$, $x \in D \subset R$ λέγεται ότι είναι συνεχής κατά Lipschitz, όταν υπάρχει κάποια θετική σταθερά γ για την οποία ισχύει:

$$|g(x) - g(y)| \leq \gamma|x - y|, \quad \forall x, y \in D \quad (2.5)$$

Ο συμβολισμός $g \in Lip_\gamma(D)$ χρησιμοποιείται για να δηλώσει την κατά Lipschitz συνέχεια της $g(\cdot)$.

Εάν $f'(x) \in Lip_\gamma(D)$ τότε, $\forall x < y \in D$ ισχύει: $|f'(x) - f'(y)|/|x - y| \leq \gamma$. Από το θεώρημα της μέσης τιμής έχουμε ότι: $|f'(x) - f'(y)|/|x - y| = |f''(\xi)|$ όπου $\xi \in [x, y]$ και ως εκ τούτου συμπεραίνεται ότι $|f''(x)| \leq \gamma$, $\forall x \in D$. Επίσης ισχύει ότι:

$$|f(y) - f(x) - (y - x)f'(x)| = \left| \frac{1}{2}(y - x)^2 f''(\xi) \right| \leq \frac{1}{2}(y - x)^2 \gamma$$

Η μέθοδος του Newton παράγει την ακολουθία $x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k)$. Εάν υποθέσουμε ότι $f' \in Lip_\gamma(D)$ και $|f'(x)| > \rho > 0, \forall x \in D$, και έστω ότι

υπάρχει ρίζα $x^* \in D$, με $f(x^*) = 0$ τότε έχουμε:

$$|x_{k+1} - x^*| = \left| x_k - x^* - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \right| = \left| x_k - x^* - \frac{f(x_k) - f(x^*)}{f'(x_k)} \right| =$$

$$\frac{1}{|f'(x_k)|} |f(x^*) - f(x_k) - (x^* - x_k)f'(x_k)| \leq \frac{1}{2\rho} |x^* - x_k|^2 \gamma$$

από όπου και προκύπτει η q -τετραγωνική τάξη, $|x_{k+1} - x^*|/|x_k - x^*|^2 \leq \frac{\gamma}{2\rho}$.
Άρα εάν η μέθοδος συγκλίνει τότε η τάξη της είναι q -τετραγωνική.

Για την σύγκλιση πρέπει επιλέον να αποδειχθεί ότι:

$$|x_{k+1} - x^*| < |x_k - x^*|, \quad \forall k > k_0$$

Έστω ότι υπάρχει αριθμός η , τέτοιος ώστε να ισχύει: $|x_0 - x^*| < \eta \leq \frac{2\rho}{\gamma}$.
Τότε έχουμε:

$$\frac{|x_1 - x^*|}{|x_0 - x^*|} \leq |x_0 - x^*| \frac{\gamma}{2\rho} < \eta \frac{\gamma}{2\rho} \leq 1$$

από όπου και συνάγεται ότι $|x_1 - x^*| \leq |x_0 - x^*| < \eta$.

Η σύγκλιση απορρέει επαγωγικά με την επαναλαμβανόμενη εφαρμογή του παραπάνω βήματος. Η προϋπόθεση λοιπόν για την σύγκλιση της μεθόδου είναι ότι η αρχική εκτίμηση x_0 για την ρίζα, ικανοποιεί την συνθήκη $|x_0 - x^*| < 2\rho/\gamma$. Σε περιπτώσεις όπου η σταθερά $2\rho/\gamma$ είναι πολύ μικρή, τότε η αρχική εκτίμηση πρέπει να είναι ήδη πολύ κοντά στην ρίζα x^* , ειδάλλως η μέθοδος δεν θα συγκλίνει.

2.3 Προβλήματα

1. Εάν η ρίζα x^* της $f(x)$ είναι επίσης ρίζα της παραγώγου $f'(x)$, δηλαδή εάν ισχύει ότι $f(x^*) = f'(x^*) = 0$ και επιπλέον $f''(x^*) \neq 0$, τότε να αποδειχθεί ότι η μέθοδος του Newton συγκλίνει q -γραμμικά στην ρίζα x^* .
2. Εάν ισχύουν $f(x^*) = f'(x^*) = 0$ και επιπλέον $f''(x^*) \neq 0$, τότε να τροποποιηθεί η μέθοδος του Newton έτσι ώστε να επιτευχθεί σύγκλιση q -τετραγωνικής τάξης.
3. Να επινοηθεί μία επαναληπτική μέθοδος (που να βασίζεται στην μέθοδο Newton), για τον υπολογισμό του αντιστρόφου $\frac{1}{a}$ ενός αριθμού a , που δεν χρησιμοποιεί την πράξη της διαίρεσης, παρά μόνο πρόσθεση, αφαίρεση και πολλαπλασιασμό. Να εκτελεσθούν οι τρεις πρώτες επαναλήψεις για $a = 9$ και $x_0 = 0.1$. Να σχολιαστεί η τάξη της σύγκλισης.

4. Να αποδειχτεί ότι εάν $f(x^*) = f''(x^*) = 0$ και $f'(x^*)f'''(x^*) \neq 0$, τότε η μέθοδος του Newton συγκλίνει q-κυβικά στην ρίζα x^* .
5. Να μελετηθεί αριθμητικά η μέθοδος που προκύπτει από την μέθοδο Newton όταν η παράγωγος $f'(x_k)$ προσεγγιστεί ως: $f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$.
Να συγκριθεί η απόδοσή της με αυτή της Newton για τις συναρτήσεις $f(x) = x^2 - 2$, $f(x) = e^{-x} - x$ και $f(x) = \frac{1}{x^2+1} - \frac{x}{30}$.

```
program newrap
* Newton Raphson method
  implicit double precision (a-h,o-z)
  x0 = 1.
  eps = 1.d-9
1  continue
  f0 = f(x0)
  write(*,*) x0,f0
  if (abs(f0) .lt. eps ) then
    write(*,*) 'Η ρίζα είναι: ',x0
    stop
  endif
  fp0 = fp(x0)
  if(fp0 .ne.0.) then
    x = x0-f0/fp0
  else
    write(*,*) 'Διάλεξε άλλο αρχικό σημείο x0'
    stop
  endif
  x0 = x
  go to 1
end

function f(x)
implicit double precision (a-h,o-z)
f = x**2-2
end

function fp(x)
implicit double precision (a-h,o-z)
fp = 2*x
end
```

Πίνακας 2.2: Η μέθοδος N/R για τον υπολογισμό της $\sqrt{2}$

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι σε μία διάσταση

Η ελαχιστοποίηση συναρτήσεων μιας μεταβλητής είναι ιδιαίτερα σημαντική, διότι εμφανίζεται συχνά ως ενδιάμεση διαδικασία κατά την ελαχιστοποίηση συναρτήσεων πολλών μεταβλητών. Προτρέχοντας, παραθέτουμε μια επανάληψη ενός τυπικού αλγορίθμου αυτού του τύπου, για την ελαχιστοποίηση μιας πολυδιάστατης συνάρτησης $f(x)$, $x \in R^n$, για την κατανόηση της χρησιμότητας των μονοδιάστατων μεθόδων.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.0.1

Γενική δομή επανάληψης μεθόδου με γραμμική αναζήτηση

1. Δεδομένου του τρέχοντος σημείου $x^{(k)}$
2. Υπολογίζεται μια φθίνουσα κατεύθυνση $s^{(k)}$
3. Ελαχιστοποιείται ως προς λ (με $\lambda > 0$) η συνάρτηση:

$$\phi(\lambda) \equiv f(x^{(k)} + \lambda s^{(k)}) \quad (3.1)$$

και εντοπίζεται η θέση του ελαχίστου $\lambda^{(k)}$

4. Τίθεται $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda^{(k)} s^{(k)}$

Στο βήμα 3 επιλύεται ένα πρόβλημα μονοδιάστατης (ως προς λ) ελαχιστοποίησης, διαδικασία που είναι γνωστή ως “γραμμική αναζήτηση”.

3.1 Μονότροπες συναρτήσεις

Στην παρούσα παράγραφο θα μελετήσουμε μεθόδους για απλά προβλήματα όπου η συνάρτηση $f(x)$ είναι μονότροπη, δηλαδή έχει μόνο ένα ελάχιστο x^* σε ένα δεδομένο διάστημα $x \in [a, b]$, και επιπλέον εάν $a \leq x_1 < x_2 \leq b$ τότε ισχύει ότι:

$$x_2 \leq x^* \iff f(x_1) > f(x_2) \quad (3.2)$$

$$x^* \leq x_1 \iff f(x_2) > f(x_1) \quad (3.3)$$

Το πρόβλημα διατυπώνεται ως εξής:

$$\min_{x \in [a, b]} f(x) \quad (3.4)$$

Το διάστημα $[a, b]$ που περιέχει την θέση του ελαχίστου, ονομάζεται διάστημα αβεβαιότητας. Το εύρος του διαστήματος ορίζεται ως $d \equiv b - a$. Εάν το εύρος του διαστήματος αβεβαιότητας είναι μικρό, τότε ήδη έχουμε μια καλή προσέγγιση για την θέση του ελαχίστου $x^* \approx (b + a)/2 \pm d/2$. Πάνω σε αυτή την απλή παρατήρηση βασίζεται ένα σύνολο μεθόδων οι οποίες έχουν ως στόχο να συρρικνώνουν διαδοχικά το διάστημα αβεβαιότητας. Η απόδοση των μεθόδων αυτού του τύπου βαθμολογείται από τον λόγο

$$r_N \equiv \frac{b_N - a_N}{b - a} \equiv \frac{d_N}{d} \quad (3.5)$$

του τελικού εύρους προς το αρχικό, και όπου N είναι ο αριθμός των αποτιμήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης $f(\cdot)$. Οι μηχανισμοί συρρίκνωσης ποικίλουν, η βασική ιδέα όμως είναι μία. Διαλέγονται δύο σημεία x_1, x_2 με $a < x_1 < x_2 < b$ και υπολογίζεται η συνάρτηση στα δύο αυτά σημεία $f_1 = f(x_1)$, $f_2 = f(x_2)$. Εάν $f_1 < f_2$ τότε το διάστημα που φράσσει το ελάχιστο είναι το $[a, x_2]$ αλλιώς εάν $f_1 > f_2$ τότε το αντίστοιχο διάστημα είναι το $[x_1, b]$. Και στις δύο περιπτώσεις το διάστημα αβεβαιότητας έχει συρρικνωθεί. Η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου το εύρος του διαστήματος αβεβαιότητας μειωθεί πέραν κάποιου προκαθορισμένου ορίου. Ο τρόπος με τον οποίο διαλέγονται τα ενδιάμεσα σημεία είναι σημαντικός και διαφορετικοί τρόποι αντιστοιχούν σε διαφορετικές μεθόδους.

3.1.1 Η μέθοδος της “Χρυσής Τομής”

Τα σημεία $x_1 < x_2$ διαλέγονται έτσι ώστε να ισαπέχουν από τα άκρα a, b . Ισχύει δηλαδή $x_1 - a = b - x_2$. Τα δύο επόμενα πιθανά διαστήματα είναι τα

$[a, x_2]$ εάν $f_2 > f_1$, και $[x_1, b]$ εάν $f_1 > f_2$, με το ίδιο εύρος $d_1 = x_2 - a = b - x_1$. Είναι θεμιτό εάν το νέο διάστημα είναι το $[a, x_2]$, το σημείο x_1 να χρησιμοποιηθεί ως ένα εκ των δύο ενδιάμεσων σημείων, διότι έτσι αποφεύγεται η εκ νέου αποτίμηση της συνάρτησης. Σε αυτή την περίπτωση τα ενδιάμεσα σημεία θα είναι τα x_3, x_1 με $a < x_3 < x_1 < x_2$. Ας θεωρήσουμε διαδοχικά μερικές τετράδες σημείων, όπως αυτές προκύπτουν από την παραπάνω θεώρηση, επιλέγοντας (χωρίς να θίγεται η γενικότητα) πάντα το αριστερό ως νέο διάστημα.

1. $[a, x_1, x_2, b]$ με εύρος $d = b - a$ και με $b - x_2 = x_1 - a \equiv w$
2. $[a, x_3, x_1, x_2]$ με εύρος $d_1 = x_2 - a = d - w$ και με $x_3 - a = x_2 - x_1 = d - 2w$ ή $x_3 = b - 2w$
3. $[a, x_4, x_3, x_1]$ με εύρος $d_2 = w$ και με $x_4 - a = x_1 - x_3 = 3w - d$ ή $x_4 = a - d + 3w$
4. $[a, x_5, x_4, x_3]$ με εύρος $d_3 = d - 2w$ και με $x_5 - a = x_3 - x_4$ ή $x_5 = b + d - 5w$

Παρατηρείστε ότι $d_1 + d_2 = x_2 - a + w = b - w - a + w = d$, και επίσης ότι $d_1 = d_2 + d_3$. Επαγωγικά δε:

$$d_k = d_{k+1} + d_{k+2} \quad (3.6)$$

Εάν ο λόγος αναγωγής του διαστήματος αβεβαιότητας r απαιτηθεί να είναι σταθερός, δηλαδή εάν

$$d_1 = rd, \quad d_2 = rd_1 = r^2d, \quad d_3 = rd_2 = r^3d, \quad \dots$$

εκ της (3.6) προκύπτει ότι $r^2 + r - 1 = 0$. Δεδομένου δε ότι $r > 0$, συνεπάγεται:

$$r = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.618$$

που είναι ο γνωστός λόγος της “Χρυσής Τομής”.

Ο πλήρης αλγόριθμος περιγράφεται με ένα διάγραμμα ροής στο σχήμα 3.1, στη σελίδα 38. Η υλοποίηση του αλγορίθμου σε μια γλώσσα προγραμματισμού είναι τετριμμένη και σε πλήρη αντιστοιχία με το διάγραμμα. Στο σχήμα 3.2 παρατίθεται μια υλοποίηση σε Fortran-77. Επίσης στο σχήμα 3.3 παρατίθεται η υλοποίηση μιας απλής συνάρτησης δοκιμής $f(x) = (x^2 - 4x + 5)^2 + (x - 2)^4$, με ελάχιστο στο $x^* = 2$.

3.1.2 Η μέθοδος Fibonacci

Η φιλοσοφία της μεθόδου Fibonacci είναι παρόμοια με αυτή της “Χρυσής Τομής”. Η κύρια διαφορά τους είναι ότι ενώ ο λόγος αναγωγής του διαστήματος αβεβαιότητας στην “Χρυσή Τομή” είναι σταθερός σε κάθε επανάληψη, στην μέθοδο Fibonacci εξαρτάται από τον δείκτη της επανάληψης. Επίσης, σε πρακτικό επίπεδο, ο αριθμός των επαναλήψεων πρέπει να είναι εκ των προτέρων γνωστός, σε αντιδιαστολή με την μέθοδο της “Χρυσής Τομής”.

Η ακολουθία Fibonacci δίδεται από τους αριθμούς:

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, \dots \quad (3.7)$$

και παράγονται από την αναδρομική σχέση (που μοιάζει με την(3.6)):

$$F_k = F_{k-1} + F_{k-2} \text{ με } F_0 = F_1 = 1 \quad (3.8)$$

Η αναδρομή (3.8) επιλύεται αναλυτικά, και οι αριθμοί Fibonacci δίδονται από την κλειστή μορφή:

$$F_k = \frac{(1 + \sqrt{5})^{k+1} - (1 - \sqrt{5})^{k+1}}{2^{k+1}\sqrt{5}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.9)$$

Εάν υποθέσουμε ότι το ικανοποιητικό εύρος του τελικού διαστήματος αβεβαιότητας είναι ίσο ή μικρότερο του h , από την (3.6) έχουμε ότι: $d_{N-2} = d_{N-1} + d_N$. Εάν δε απαιτήσουμε ότι $d_{N-1} = d_N = h$ τότε έχουμε:

$$\begin{aligned} d_N &= h = F_0 h \\ d_{N-1} &= h = F_1 h \\ d_{N-2} &= 2h = F_2 h \\ &\dots \\ d_{N-k} &= F_k h \\ &\dots \\ d_1 &= F_{N-1} h \\ d &= F_N h \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ο N επιλέγεται ως ο μικρότερος ακέραιος για τον οποίο ισχύει: $\frac{d}{h} \leq F_N$, και δεδομένου πλέον του N , επαναπροσδιορίζεται το τελικό διάστημα $h = d/F_N$, και υπολογίζονται τα d_1, d_2, d_3, \dots από την (3.10).

Το αρχικό διάστημα $[a, b]$ διαμερίζεται ως: $[a, x_1, x_2, b]$ με $x_1 = b - F_{N-1}h$ και $x_2 = a + F_{N-1}h$. Εάν δε $f(x_1) < f(x_2)$, το διάστημα $[a, x_2]$ διαμερίζεται ως: $[a, x_3, x_4, x_2]$, όπου $x_3 = x_2 - F_{N-2}h$ και $x_4 = a + F_{N-2}h$. Εύκολα μπορεί κανείς να διαπιστώσει ότι $x_4 = x_1$, οπότε και αποφεύγεται η επιπλέον αποτίμηση της συνάρτησης, όπως άλλωστε και στην περίπτωση της “Χρυσής Τομής”. Παρόμοια είναι η διαδικασία όταν $f(x_1) > f(x_2)$.

Ο λόγος αναγωγής του διαστήματος στην επανάληψη m δίδεται από:

$$r_m \equiv \frac{d_{m+1}}{d_m} = \frac{F_{N-m-1}}{F_{N-m}} \xrightarrow{N-m \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{5}-1}{2}$$

Βλέπουμε ότι ασυμπτωτικά ο λόγος αναγωγής της Fibonacci προσεγγίζει τον σταθερό λόγο της “Χρυσής Τομής”.

3.1.3 Μέθοδος παραβολικής παρεμβολής

Δεδομένων των άκρων του διαστήματος αβεβαιότητας a, b , η ιδέα είναι να βρεθεί ένα ενδιάμεσο σημείο $x_m \in [a, b]$ με $f(x_m) < \min(f(a), f(b))$, και εν συνεχεία να ευρεθεί ένα τέταρτο σημείο x_s τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την μοναδική παραβολή που διέρχεται από τα τρία σημεία $(a, f(a)), (x_m, f(x_m)), (b, f(b))$.

$$x_s = \frac{a+b}{2} - \frac{1}{2} \frac{\frac{f(b)-f(a)}{b-a}}{\frac{\frac{f(x_m)-f(a)}{x_m-a} - \frac{f(b)-f(a)}{b-a}}{x_m-b}} \quad (3.11)$$

Η περαιτέρω διαδικασία είναι αυτή που ακολουθείται για τις μονότροπες συναρτήσεις με κάποιες μικρές παραλλαγές, που φαίνονται στο διάγραμμα ροής στο σχήμα 3.4 στη σελίδα 41.

3.1.4 Η μέθοδος της διχοτόμησης

Η μέθοδος της διχοτόμησης που θα περιγράψουμε, απαιτεί τον υπολογισμό της παραγώγου $f'(x) \equiv \frac{df(x)}{dx}$ και επίσης ότι στα άκρα του διαστήματος αβεβαιότητας ισχύει $f'(a) < 0$, $f'(b) > 0$. Η μέθοδος δεν χρησιμοποιεί τιμές της συνάρτησης όταν πρόκειται για μονότροπες συναρτήσεις και βασίζεται μόνο στο πρόσημο της παραγώγου. Στην επανάληψη k , δεδομένου του διαστήματος $[a_k, b_k]$ με $f'(a_k) < 0$ και $f'(b_k) > 0$ επιλέγεται το σημείο στο μέσον του διαστήματος $c_k = \frac{a_k+b_k}{2}$ και υπολογίζεται η παράγωγος $f'(c_k)$. Εάν $f'(c_k) > 0$ τότε το νέο διάστημα είναι το $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [a_k, c_k]$. Εάν $f'(c_k) < 0$ τότε

το νέο διάστημα είναι το $[a_{k+1}, b_{k+1}] = [c_k, b_k]$. Η μέθοδος της διχοτόμησης ανάγει σε κάθε επανάληψη το διάστημα αβεβαιότητας κατά 50%, οπότε σε N επαναλήψεις έχουμε: $d_N = \frac{1}{2^N}d$. Εν πρώτοις συμπεραίνεται ότι η διχοτόμηση είναι ταχύτερη από την μέθοδο της “Χρυσής Τομής”, διότι απαιτεί μικρότερο αριθμό επαναλήψεων. Ο υπολογιστικός φόρτος ανά επανάληψη είναι όμως διαφορετικός, δεδομένου ότι στην διχοτόμηση απαιτείται ο υπολογισμός της παραγώγου και όχι της συνάρτησης και για να είναι εφικτή μια σύγκριση πρέπει και αυτό να ληφθεί υπόψη. Εάν τ_f, τ_g είναι οι απαιτούμενοι χρόνοι υπολογισμού για την συνάρτηση και την παράγωγο, και t_f, t_g οι απαιτούμενοι χρόνοι για την “Χρυσή Τομή” και την διχοτόμηση τέτοιοι ώστε τα τελικά διαστήματα αβεβαιότητας να είναι ίσα, τότε

$$\frac{t_f}{t_g} = \frac{\log(1/2)}{\log(.618)} \frac{\tau_f}{\tau_g} \approx 1.44 \frac{\tau_f}{\tau_g}$$

Είναι πλέον προφανές πότε πρέπει να προτιμηθεί η “Χρυσή Τομή” και πότε η διχοτόμηση.

Υπάρχουν και άλλα σχήματα για την μονοδιάστατη ελαχιστοποίηση, όπως π.χ. παρεμβολή με πολυώνυμο τρίτου βαθμού, όπου οι τιμές της συνάρτησης και της παραγώγου στα άκρα του διαστήματος χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό των τεσσάρων παραμέτρων του πολυωνύμου, το οποίο στην συνέχεια ελαχιστοποιείται αναλυτικά και ακολουθείται αντίστοιχη διαδικασία όπως και στην μέθοδο της παραβολικής παρεμβολής.

Για την συνάρτηση που εμφανίζεται στο σχήμα 3.3, και για αρχικό διάστημα αβεβαιότητας $[-5, 30]$ η απόδοση των μεθόδων της “Χρυσής Τομής” και της παραβολικής παρεμβολής παρατίθεται στον πίνακα 3.1, όπου N ο αριθμός των επαναλήψεων, x_N το εκτιμώμενο ελάχιστο και Δ το ήμισυ του εύρους του τελικού διαστήματος αβεβαιότητας.

“Χρυσή Τομή”			Παραβολική παρεμβολή		
N	x_N	Δ	N	x_N	Δ
17	1.9824	0.0340	14	1.9960	0.0070
21	2.0007	0.0050	16	1.9995	0.0008
26	1.9999	0.0004	18	1.9999	0.0001
50	2.0000	10^{-8}	27	2.0000	10^{-8}

Πίνακας 3.1: Απόδοση των μεθόδων της “Χρυσής Τομής” και Παραβολικής παρεμβολής για την συνάρτηση του σχήματος 3.3

3.2 Γραμμική Αναζήτηση

Ο επακριβής εντοπισμός του ελαχίστου είναι υπολογιστικά δαπανηρός, όπως άλλωστε φαίνεται από τα στοιχεία που εμφανίζονται στον πίνακα 3.1. Για τις ανάγκες της πολυδιάστατης ελαχιστοποίησης όμως ο ακριβής εντοπισμός του ελαχίστου δεν είναι αναγκαίος. Παρόλα αυτά υπάρχουν κάποιες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται από την μονοδιάστατη ελαχιστοποίηση ώστε ο αλγόριθμος 3.0.1 να είναι αποτελεσματικός. Η διαδικασία του προσεγγιστικού εντοπισμού του ελαχίστου, που ικανοποιεί τις ως άνω συνθήκες ονομάζεται “γραμμική αναζήτηση” (ΓΑ).

Η ΓΑ πρέπει να εξασφαλίζει βήματα:

1. Τέτοια ώστε να μειώνεται σημαντικά η τιμή της συνάρτησης.
2. Πεπερασμένου (μη απειροστού) μεγέθους για ταχεία σύγκλιση.

Η πρώτη απαίτηση εκφράζεται μέσω της συνθήκης Armijo [Arm66], που διατυπώνεται ως εξής:

$$f(x + \lambda s) \leq f(x) + c_1 \lambda s^T \nabla f(x) \quad (3.12)$$

όπου s φθίνουσα κατεύθυνση στο σημείο x , $\lambda \geq 0$ και $c_1 \in (0, 1)$. Οι επιτρεπτές τιμές του λ είναι μόνον όσες ικανοποιούν την (3.12), όπως φαίνεται και στο σχήμα 3.5.

Η δεύτερη απαίτηση εκφράζεται μέσω της συνθήκης Wolfe [Wol69]:

$$s^T \nabla f(x + \lambda s) \geq c_2 s^T \nabla f(x) \quad (3.13)$$

με $c_2 \in (c_1, 1)$. Στο σχήμα 3.6 (σελίδα 43), φαίνεται ο τρόπος που αποφεύγονται οι πολύ μικρές τιμές για το βήμα λ . Η συνθήκη Wolfe δεν είναι μοναδική. Έχουν προταθεί εναλλακτικές συνθήκες για την ικανοποίηση της δεύτερης απαίτησης. Για παράδειγμα η συνθήκη:

$$f(x + \lambda s) \geq (1 - c_1) \lambda s^T \nabla f(x) \quad (3.14)$$

γνωστή ως συνθήκη Goldstein [Gol65]. Η συνθήκη (3.14) αποκλείει σε πολλές περιπτώσεις και αυτό καθαυτό το ελάχιστο και ως εκ τούτου αποφεύγεται από τις περισσότερες υλοποιήσεις. Η συνθήκη που αποδίδει καλύτερα στην πράξη και που θέτει ένα άνω φράγμα για το βήμα λ , είναι η τροποποιημένη συνθήκη Wolfe:

$$|s^T \nabla f(x + \lambda s)| \leq c_2 |s^T \nabla f(x)| \quad (3.15)$$

Οι συνθήκες (3.12, 3.15) είναι γνωστές με το όνομα “Ισχυρές συνθήκες Wolfe” ή “Ισχυρές συνθήκες Wolfe-Powell”, οι δε συνθήκες (3.12, 3.13), σε αντιδιαστολή, “Ασθενείς συνθήκες Wolfe” ή “Ασθενείς συνθήκες Wolfe-Powell”.

3.2.1 Armijo και οπισθοχώρηση

Για μεθόδους τύπου Newton (που θα μελετηθούν σε άλλη ενότητα) η επιλογή $\lambda = 1$, είναι συχνά η βέλτιστη. Για αυτό το λόγο αντί να χρησιμοποιείται η συνθήκη Wolfe (3.13), χρησιμοποιείται μόνο η συνθήκη Armijo (3.12) με την αναζήτηση να ξεκινά από την τιμή $\lambda = 1$ και να μειώνεται διαδοχικά έως ότου ικανοποιηθεί η συνθήκη Armijo.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.2.1

Μέθοδος ΓΑ με οπισθοχώρηση

1. Τίθενται $\lambda = 1$, $c_1 \in (0, 1)$, $\rho \in (0, 1)$
2. Εάν $f(x + \lambda s) \leq f(x) + c_1 \lambda s^T \nabla f(x)$ τότε:
Τερματίζεται η διαδικασία με $\lambda^ = \lambda$*
Ειδάλλως:
Τίθεται $\lambda = \rho \lambda$ και επαναλαμβάνεται το βήμα 2.

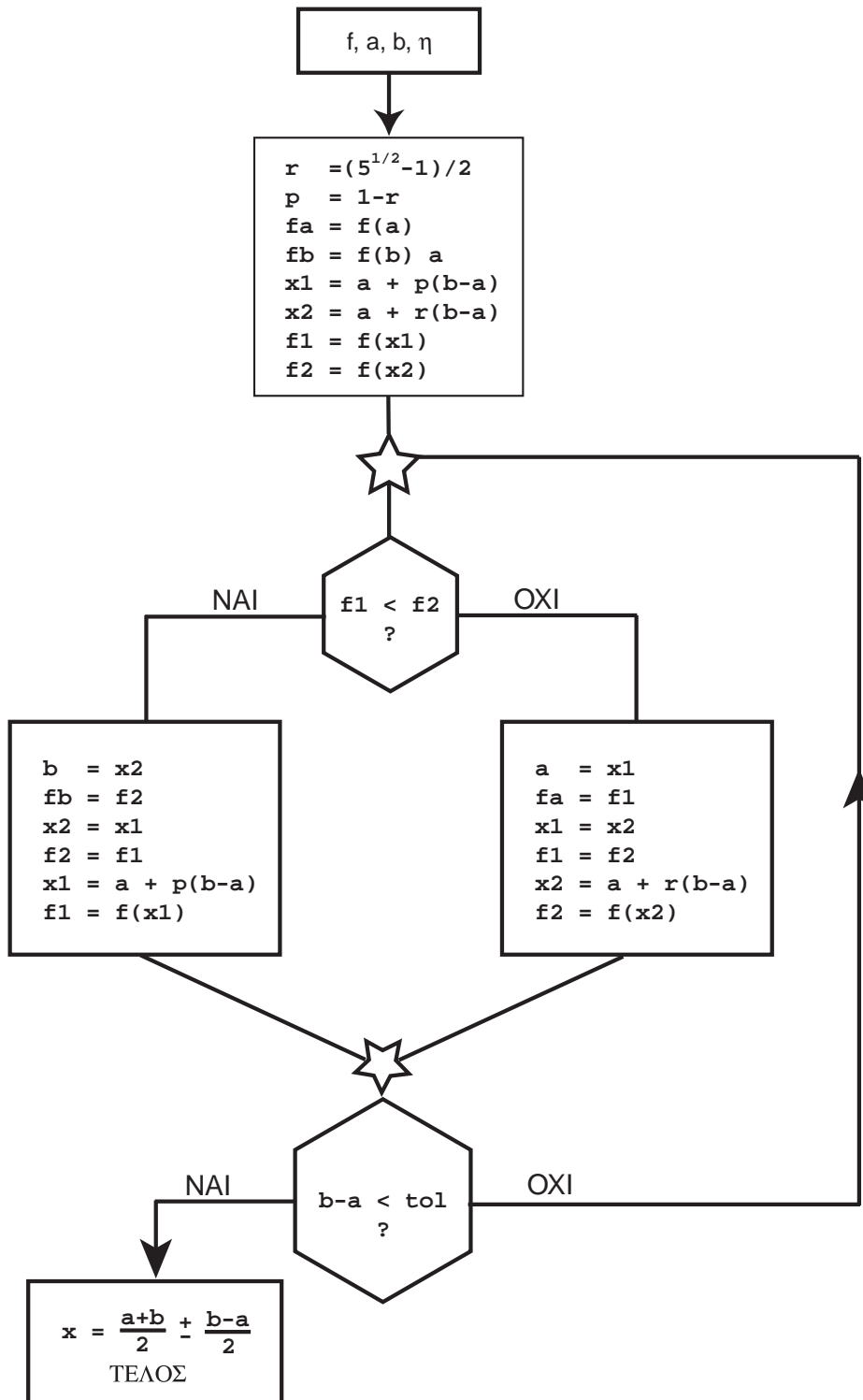
Με τον τρόπο αυτό εξασφαλίζεται η σημαντική μείωση της τιμής της συνάρτησης μέσω της συνθήκης Armijo, καθώς και το πεπερασμένο του βήματος μέσω της οπισθοχώρησης.

Στα βιβλία του R. Fletcher [Fle95] και των Dennis & Schnabel [DS96], υπάρχουν λεπτομερείς περιγραφές αλγορίθμων για την γραμμική αναζήτηση.

3.3 Προβλήματα

1. Δεδομένου ότι η συνάρτηση $f(x)$ με $x \in R$, είναι συνεχής, παραγωγίσιμη και μονότροπη στο διάστημα $[a, b]$:
 - (a) Σχεδιάστε ένα διάγραμμα ροής για την ελαχιστοποίηση με την μέθοδο της διχοτόμησης.
 - (b) Κατασκευάστε την αντίστοιχη υλοποίηση σε Fortran-77.
2. Δεδομένων των προϋποθέσεων του προηγούμενου προβλήματος:

- (a) Αναπτύξτε μια μέθοδο “κυβικής παρεμβολής”, κατ’ αναλογία με την μέθοδο της “παραβολικής παρεμβολής”, όπου το παρεμβάλον πολυώνυμο $p(x)$ είναι τρίτου βαθμού και ικανοποιεί:
 $p(a) = f(a)$, $p'(a) = f'(a)$, $p(b) = f(b)$, $p'(b) = f'(b)$.
- (b) Σχεδιάστε το διάγραμμα ροής.
- (c) Κατασκευάστε την αντίστοιχη υλοποίηση σε Fortran-77.
3. Αποδείξτε ότι οι ασθενείς Wolfe-Powell συνθήκες, δεδομένου ότι η ευθεία $f(x) + c_1 \lambda s^T \nabla f(x)$ τέμνει την $f(x + \lambda s)$ στο $\lambda = \lambda'$, εγγυώνται ότι είναι υπαρκτό ένα διάστημα τιμών πεπερασμένου εύρους για το βήμα λ .
4. Ακολουθώντας το διάγραμμα ροής του σχήματος 3.4, υλοποιήστε τον αλγόριθμο της παραβολικής παρεμβολής σε Fortran-77.



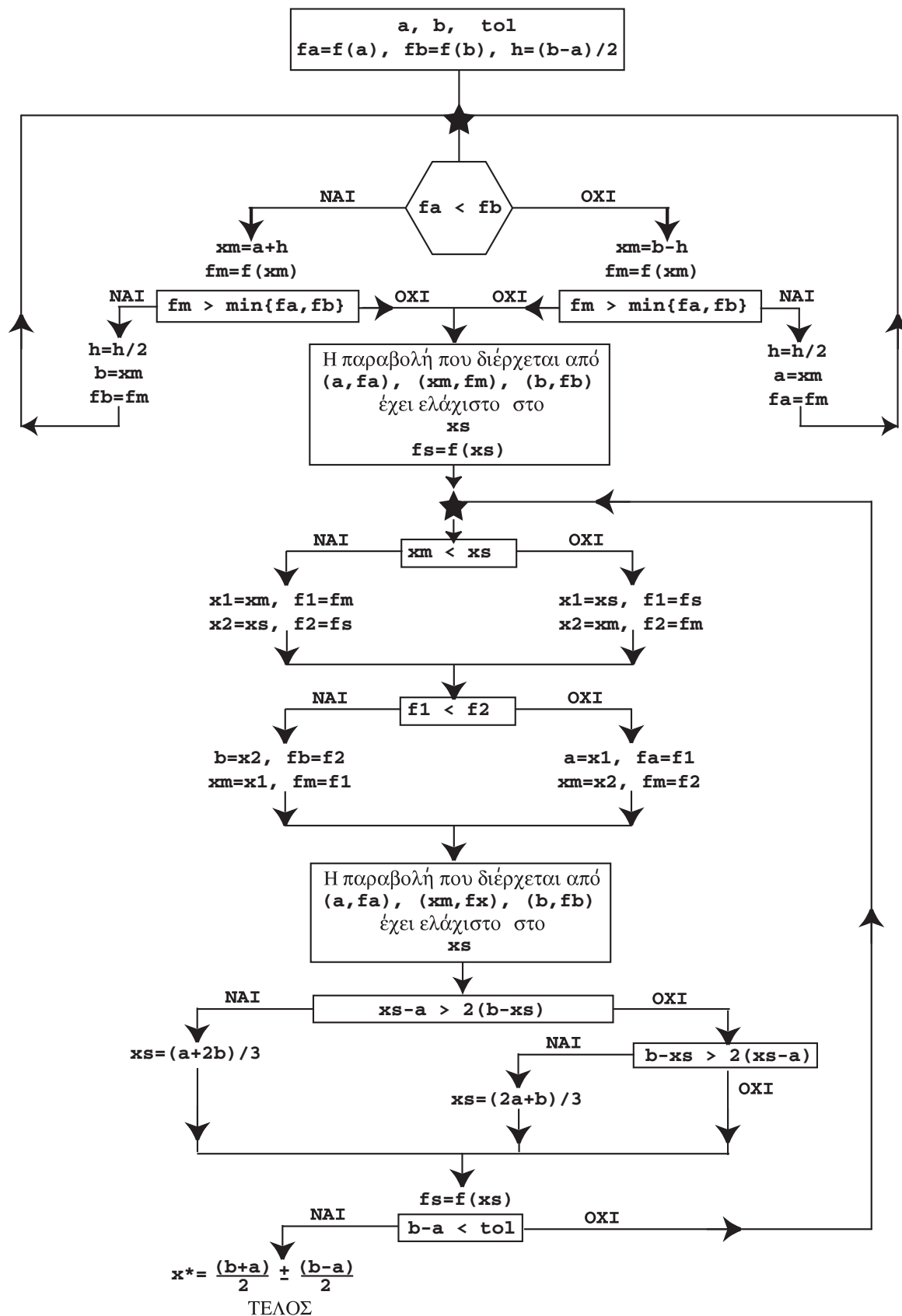
Σχήμα 3.1: Διάγραμμα ροής για τον αλγόριθμο της “Χρυσής Τομής”

```
program golden
implicit double precision (a-h,o-z)
tol = 1.d-2
r = 0.5d0*(sqrt(5.d0)-1.d0)
p =1.d0 - r
a= -4.d0
b= 27.d0
fa = f(a)
fb = f(b)
x2 = a + r*(b-a)
x1 = a + p*(b-a)
f1 = f(x1)
f2 = f(x2)
icount = 4
30 continue
write(*,90) a,b
90 format(2x,'[a , b] = [',e14.7,' , 'e14.7,' ]')
if (f1 .lt. f2 ) then
    b = x2
    fb = f2
    x2 = x1
    f2 = f1
    x1 = a + p*(b-a)
    f1 = f(x1)
else
    a = x1
    fa = f1
    x1 = x2
    f1 = f2
    x2 = a + r*(b-a)
    f2 = f(x2)
endif
icount = icount +1
if (b-a .le. tol ) then
    write(*,91) (a+b)/2,(b-a)/2,icount
91 format(' Golden Section: ',t25,d21.14,' +/- ',d21.14,2x,i)
    stop
endif
go to 30
end
```

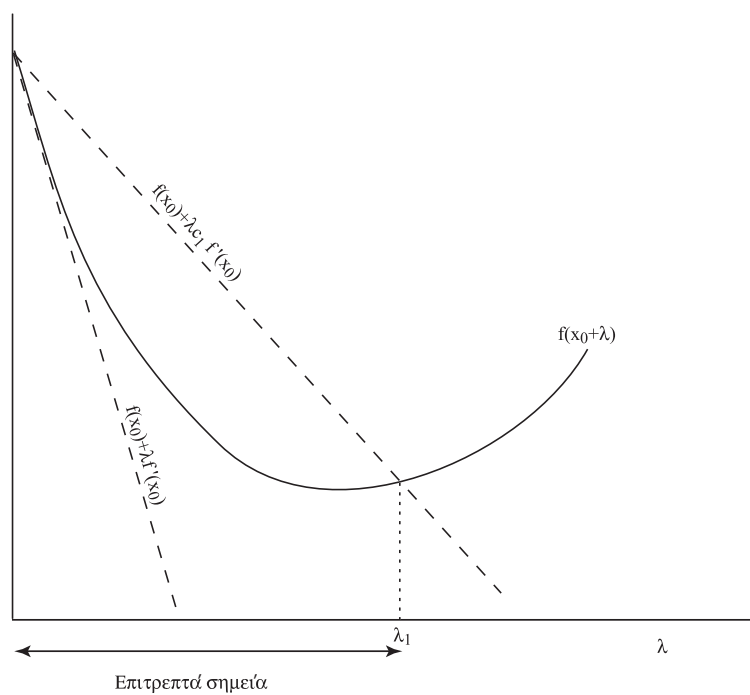
Σχήμα 3.2: Υλοποίηση του αλγορίθμου της “Χρυσής Τομής” σε Fortran-77

```
function f(x)
implicit double precision (a-h,o-z)
f = (x**2-4*x+5)**2 +(x-2)**4
end
```

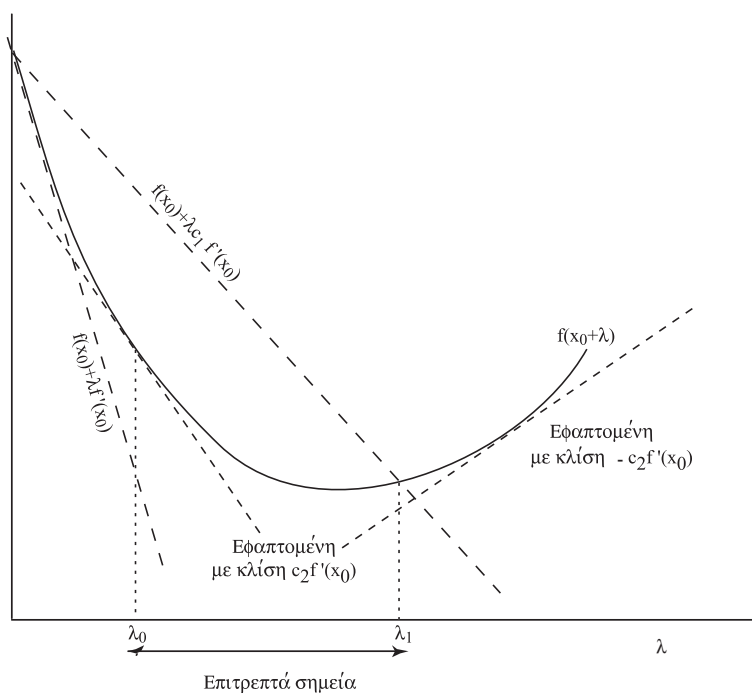
Σχήμα 3.3: Υλοποίηση της $f(x) = (x^2 - 4x + 5)^2 + (x - 2)^4$ σε Fortran-77



Σχήμα 3.4: Διάγραμμα ροής για τον αλγόριθμο της τετραγωνικής παρεμβολής



Σχήμα 3.5: Γραφική αναπαράσταση της συνθήκης Armijo (3.12)



Σχήμα 3.6: Γραφική αναπαράσταση της συνθήκης Wolfe (3.13)

Κεφάλαιο 4

Ελαχιστοποίηση τετραγωνικών συναρτήσεων

Η ελαχιστοποίηση τετραγωνικών συναρτήσεων είναι ιδιαίτερα σημαντική διαδικασία, διότι αποτελεί ενδιάμεσο βήμα για την ελαχιστοποίηση πολυδιάστατων μη-γραμμικών συναρτήσεων στο πλαίσιο των μεθόδων “Περιοχών Εμπιστοσύνης (ΠΕ)”. Οι μέθοδοι ΠΕ προσεγγίζουν την συνάρτηση στην περιοχή ενός σημείου x , χρησιμοποιώντας τους πρώτους όρους του αναπτύγματος Taylor:

$$f(x + h) - f(x) \approx h^T \nabla f(x) + \frac{1}{2} h^T \nabla^2 f(x) h$$

Η παραπάνω προσέγγιση είναι ακριβής μόνον όταν το βήμα h ανήκει σε μία περιορισμένης έκτασης περιοχή, η οποία αποκαλείται περιοχή εμπιστοσύνης. Παραθέτουμε μια επανάληψη ενός γενικού αλγορίθμου αυτού του είδους, για την κατανόηση της χρησιμότητας της παραπάνω διαδικασίας.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 4.0.1

Γενική δομή επανάληψης μεθόδου περιοχής εμπιστοσύνης

1. Δεδομένων του σημείου $x^{(k)}$ και της ΠΕ Ω_k :
2. Κατασκευάζεται ένα τετραγωνικό μοντέλο $q(h) \approx f(x^{(k)} + h) - f(x^{(k)})$
3. Εντοπίζεται το $h_k \in \Omega_k$ που ελαχιστοποιεί το μοντέλο $q(h)$
4. Τίθεται $x^{(k+1)} = x^{(k)} + h_k$
5. Αναπροσαρμόζεται η περιοχή εμπιστοσύνης σε Ω_{k+1}

Στο βήμα 3 ελαχιστοποιείται μια τετραγωνική συνάρτηση υπό τον περιορισμό: $h \in \Omega_k$. Συνήθως ο περιορισμός αυτός διατυπώνεται ως: $\|h\| \leq R$ και αντιστοιχεί σε μια σφαιρική περιοχή ακτίνας R . Το πρόβλημα που πρέπει να αντιμετωπισθεί διατυπώνεται ως εξής:

$$\min_h q(h) \equiv \frac{1}{2}h^T B h + g^T h, \text{ υπό τον περιορισμό: } \|h\| \leq R \quad (4.1)$$

όπου ο πίνακας B είναι τετραγωνικός $n \times n$, συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Η λύση του προβλήματος χωρίς τον περιορισμό δίδεται από το βήμα Newton:

$$h_N = -B^{-1}g \quad (4.2)$$

Εάν $\|h_N\| \leq R$, τότε το πρόβλημα έχει επιλυθεί με $h^* = h_N$. Εάν $\|h_N\| > R$, τότε λύνουμε το πρόβλημα με τον ισοτικό περιορισμό:

$$\min_h q(h) \equiv \frac{1}{2}h^T B h + g^T h, \text{ υπό τον περιορισμό: } \|h\| = R \quad (4.3)$$

Το ως άνω πρόβλημα (4.3), επιδέχεται είτε ακριβή είτε προσεγγιστική επίλυση, χωρίς να επηρεάζεται ιδιαίτερα η διαδικασία του αλγορίθμου 4.0.1. Θα περιγραφούν παρακάτω και οι δύο περιπτώσεις.

4.1 Ακριβής επίλυση

Η συνήθης αντιμετώπιση είναι μέσω της θεωρίας των πολλαπλασιαστών του Lagrange. Εδώ θα ακολουθήσουμε μια διαδικασία που χρησιμοποιεί μια μέθοδο τιμωρίας με αντικειμενική συνάρτηση:

$$Q(h) = q(h) + \frac{1}{2}\lambda(\|h\| - R)^2 \quad (4.4)$$

Παραγωγίζοντας και θέτοντας $\nabla Q(h^*) = 0$, έχουμε:

$$\left(B + \lambda \left(1 - \frac{R}{\|h^*\|} \right) \right) h^* = -g \quad (4.5)$$

Στο όριο όταν $\lambda \rightarrow \infty$, τότε $\|h^*\| \rightarrow R$, οπότε το γινόμενο $\alpha \equiv \lambda \left(1 - \frac{R}{\|h^*\|} \right)$ είναι αόριστο. Το α δεν μπορεί να είναι μηδέν, γιατί τότε το προκύπτον από την (4.5) $h^* = h_N$, δεν ικανοποιεί την απαίτηση $\|h^*\| = R$. Επίσης $\alpha \neq \infty$

διότι τότε $\|h^*\| = 0$. Το α αντιμετωπίζεται ως παράμετρος και το πρόβλημα επιδέχεται την λύση:

$$h^*(\alpha) = -(B + \alpha I)^{-1} g \quad (4.6)$$

το δε α επιλέγεται έτσι ώστε να ικανοποιείται ο περιορισμός:

$$\|h^*(\alpha)\| = R, \text{ ή ισοδυνάμως: } g^T (B + \alpha I)^{-2} g = R^2 \quad (4.7)$$

Η τελευταία εξίσωση (4.7) μπορεί να επιλυθεί (ως προς α) με πολλούς τρόπους, όπως π.χ. με την μέθοδο Newton-Raphson. Σημειώστε ότι σε κάθε επανάληψη πρέπει να επιλύεται το γραμμικό σύστημα $(B + \alpha I)h^*(\alpha) = -g$, γεγονός που επιβαρύνει τον υπολογισμό ιδιαίτερα όταν πρόκειται για προβλήματα μεγάλων διαστάσεων.

4.2 Προσεγγιστική επίλυση

Παρατηρώντας την εξίσωση (4.6) βλέπουμε ότι για $\alpha \rightarrow 0$ η λύση είναι στην κατεύθυνση του βήματος Newton $h_N = -B^{-1}g$, για δε $\alpha \gg \lambda_{max}$, όπου λ_{max} η μέγιστη ιδιοτιμή του θετικά ορισμένου πίνακα B , η λύση είναι στην κατεύθυνση της κλίσης g . Για ενδιάμεσες τιμές του α η λύση μπορεί να προσεγγιστεί από ένα γραμμικό συνδιασμό των διανυσμάτων h_N και g . Ο Powell πρότεινε την εξής διαδικασία. Το ελάχιστο πάνω στην διεύθυνση του $-g$ είναι το σημείο Cauchy και δίδεται από¹:

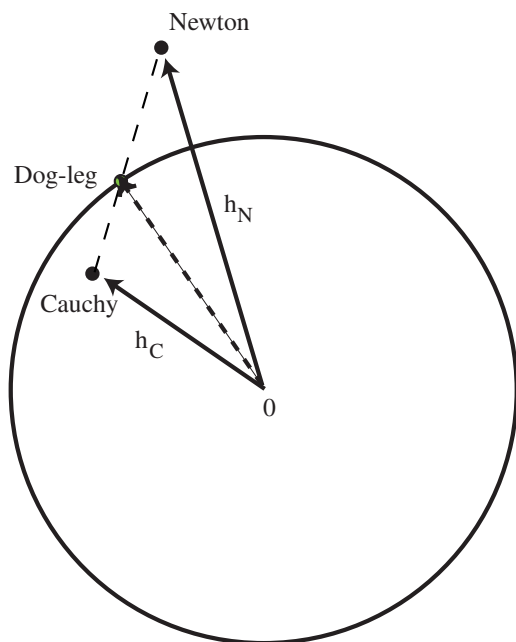
$$h_C = -\frac{g^T g}{g^T B g} g \quad (4.8)$$

Η διαδρομή από το $h = 0$ στο $h = h_C$ ($h = 0 \rightarrow h_C$) είναι μονοτόνως φθίνουσα, διότι το σημείο Cauchy είναι ελάχιστο. Η διαδρομή $h = h_C \rightarrow h_N$ αποδεικνύεται ότι είναι επίσης μονοτόνως φθίνουσα. Το σημείο που η διαδρομή $h = 0 \rightarrow h_C \rightarrow h_N$ τέμνει την σφαίρα ακτίνας R , ονομάζεται σημείο *κυνόπους* ή *Dogleg* κατά Powell. Η ως άνω παρεμβολή επιδεικνύεται στο σχήμα 4.1 για την περίπτωση που $\|h_C\| \leq R$. Εάν $\|h_C\| > R$, τότε διαλέγουμε το σημείο $h_g = -\frac{R}{\|g\|}g$, που η διαδρομή $h = 0 \rightarrow h_C$ τέμνει την σφαίρα.

Εάν $\|h_C\| \leq R$, τότε το διάνυσμα “κυνόπους” γράφεται ως:

$$h_a(\mu) = h_C + \mu(h_N - h_C), \quad \mu \in (0, 1) \quad (4.9)$$

¹Τούτο συνάγεται εύκολα εάν θέσουμε $h = -\beta g$ και ελαχιστοποιήσουμε το μοντέλο $q(h) = q(-\beta g)$ ως προς β .



Σχήμα 4.1: Η προσέγγιση “κυνόπους” (Dogleg) του Powell

και το μ διαλέγεται έτσι ώστε να ικανοποιείται η $\|h_d(\mu)\| = R$, η οποία οδηγεί σε μια αλγεβρική εξίσωση δευτέρου βαθμού. Εκ των δύο ριζών επιλέγεται η θετική, η οποία είναι μοναδική και ίση προς:

$$\mu = \frac{\sqrt{[h_C^T(h_N - h_C)]^2 + \|h_N - h_C\|^2 [R^2 - \|h_C\|^2]} - h_C^T(h_N - h_C)}{\|h_N - h_C\|^2} \quad (4.10)$$

Η προσεγγιστική αντιμετώπιση έχει πολύ μικρότερο υπολογιστικό κόστος και σε προβλήματα μεγάλης διάστασης είναι ως εκ τούτου προτιμητέα.

Οι περιοχές εμπιστοσύνης δύνανται να έχουν οποιοδήποτε γεωμετρικό σχήμα. Το σφαιρικό σχήμα προτιμάται λόγω της απλότητας της περιγραφής του από μία και μόνο παράμετρο, την ακτίνα R . Ελλειψοειδείς και ορθογώνιες περιοχές σε αντιδιαστολή, περιγράφονται από n και $2 \times n$ παραμέτρους αντίστοιχα.

4.3 Προβλήματα

Κεφάλαιο 5

Μέθοδοι ελαχιστοποίησης

Στο παρόν κεφάλαιο θα αναπτυχθούν οι αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την επίλυση προβλημάτων ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Οι μέθοδοι ανάλογα με την πληροφορία που χρησιμοποιούν κατατάσσονται στις εξής κατηγορίες.

- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν μόνο τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης. Συνήθως αναφέρονται ως "άμεσες μέθοδοι" (direct methods).
- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης και των πρώτων μερικών παραγώγων της (το διάνυσμα κλίσης).
- Μέθοδοι που χρησιμοποιούν τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης, των πρώτων και επίσης των δεύτερων μερικών παραγώγων της (τον Εσσιανό πίνακα).

Οι άμεσες μέθοδοι προτιμούνται για συναρτήσεις για τις οποίες οι παράγωγοι δεν υπάρχουν ή είναι ασυνεχείς; επίσης όταν δεν υπάρχει κωδικοποίηση παρά μόνο για την αντικειμενική συνάρτηση, όπως συνήθως συμβαίνει σε προβλήματα προερχόμενα από βιομηχανικές εφαρμογές. Εν γένει οι άμεσες μέθοδοι, όταν εφαρμόζονται σε αντικειμενικές συναρτήσεις με συνεχείς παραγώγους, υπολείπονται σε απόδοση των άλλων.

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν την κλίση είναι ίσως οι πλέον διαδεδομένες. Η απόδοση κάποιων εξ αυτών είναι εξαιρετική και επίσης αποφεύγουν τον χρονοβόρο υπολογισμό του πίνακα των δευτέρων παραγώγων.

Σε περιπτώσεις που ο Εσσιανός πίνακας (Hessian) είναι διαθέσιμος ή δεν είναι χρονοβόρος ο υπολογισμός του, τότε προτιμητέα είναι η τρίτη κατηγορία μεθόδων.

5.1 Άμεσες μέθοδοι

Στην κατηγορία αυτή εμπίπτουν μεταξύ άλλων η μέθοδος του "πολυτόπου" γνωστή και ως "μέθοδος Simplex"¹, μέθοδοι αναζήτησης ίχνους (pattern search) και στοχαστικές μέθοδοι ή μέθοδοι τυχαίας αναζήτησης.

5.2 Μέθοδοι βασισμένες στο διάνυσμα κλίσης

Στην κατηγορία αυτή εμπίπτουν οι μέθοδοι της "οξύτατης πτώσης" (steepest descent), των συζυγών κλίσεων (conjugate gradients) και των μεθόδων "μεταβλητής μετρικής" (variable metric) γνωστές και ως μέθοδοι "χορδής" (secant methods) ή και ως "Quasi Newton"

5.2.1 Η μέθοδος της οξύτατης πτώσης

Η μέθοδος αυτή γνωστή και ως "η μέθοδος της κλίσης", είναι ίσως η παλαιότερη μέθοδος βελτιστοποίησης αυτής της κατηγορίας. Επίσης λόγω της απλότητας της υλοποίησής της έχει χρησιμοποιηθεί ευρύτατα παρότι δεν είναι μέθοδος υψηλής αποτελεσματικότητας. Η μέθοδος είναι επαναληπτική και εφαρμόζει σε κάθε βήμα την τεχνική της γραμμικής αναζήτησης (της παραγράφου 3.2) στα πλαίσια του αλγορίθμου 3.0.1. Η φθίνουσα κατεύθυνση που επιλέγεται από την μέθοδο στο δεύτερο βήμα του αλγορίθμου είναι:

$$s^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)}) = -g(x^{(k)}) \quad (5.1)$$

Κατά συνέπεια τα διαδοχικά σημεία που επιλέγονται από την μέθοδο της "οξύτατης πτώσης" δίδονται από την σχέση:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \lambda g(x^{(k)}) \quad (5.2)$$

το δε λ καθορίζεται από την γραμμική αναζήτηση.

Στην ειδική περίπτωση που η αντικειμενική συνάρτηση είναι τετραγωνική, οι ιδιότητες σύγκλισης της μεθόδου μπορούν να μελετηθούν αναλυτικά. Χάριν απλότητας και χωρίς βλάβη της γενικότητας θα θεωρήσουμε την συνάρτηση:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx \quad \text{με κλίση: } \nabla f(x) \equiv g(x) = Qx \quad (5.3)$$

¹Πρόκειται για διαφορετική μέθοδο από την Simplex του γραμμικού προγραμματισμού

η οποία έχει ελάχιστο στο $x = 0$. (Ο πίνακας Q είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος). Χρησιμοποιώντας τις συντομογραφίες $f^{(k)} = f(x^{(k)})$ και $g^{(k)} = g(x^{(k)})$ είναι σχετικά εύκολο να αποδειχθεί ότι:

$$f^{(k+1)} = \left[1 - \frac{(g^{(k)T} g^{(k)})^2}{(g^{(k)T} Q g^{(k)})(g^{(k)T} Q^{-1} g^{(k)})} \right] f^{(k)} \quad (5.4)$$

Η ποσότητα εντός των αγκυλών, όπως προκύπτει χρησιμοποιώντας την ανισότητα του Kantorovich, φράσσεται άνωθεν από την παράσταση:

$$c = \left(\frac{q_n - q_1}{q_n + q_1} \right)^2 \quad (5.5)$$

όπου q_n , q_1 η μέγιστη και η ελάχιστη ιδιοτιμή του Q .

Είναι προφανές ότι $c < 1$ και έτσι η ακολουθία $f^{(n)}$ συγκλίνει q-γραμμικά στο μηδέν. Επειδή δε ο πίνακας Q είναι θετικά ορισμένος, το όριο αυτό επιτυγχάνεται μόνον όταν το $x^{(n)} \rightarrow 0$.

Ανισότητα Kantorovich

Εάν ο πίνακας Q , είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, με ιδιοτιμές q_1, q_2, \dots, q_n διατεταγμένες κατ'αύξουσα σειρά, και $y \in R^n$ ισχύει ότι:

$$\frac{y^T Q y}{y^T y} \frac{y^T Q^{-1} y}{y^T y} \leq \frac{(q_n + q_1)^2}{4q_n q_1} \quad (5.6)$$

Απόδειξη

Ο πίνακας Q διαγωνοποιείται ως $Q = S^T D S$ όπου S ορθογώνιος πίνακας ($S^T S = S S^T = I$), και D διαγώνιος με στοιχεία q_1, q_2, \dots, q_n . Ορίζοντας το μοναδιαίο διάνυσμα $p = S y / \sqrt{y^T y}$, το αριστερό μέλος της (5.6) γράφεται ως:

$$(p^T D p)(p^T D^{-1} p) = \left(\sum_{k=1}^n q_k p_k^2 \right) \left(\sum_{k=1}^n \frac{p_k^2}{q_k} \right) \quad (5.7)$$

Επειδή $q_1 > 0$, συνεπεία του ότι ο Q είναι θετικά ορισμένος, ισχύει ότι: $(q_k - q_1)(q_k - q_n) \leq 0$, $\forall k \in 1, 2, \dots, n$ και συνεπάγεται ότι

$$\sum_{k=1}^n q_k p_k^2 + q_1 q_n \sum_{k=1}^n \frac{p_k^2}{q_k} \leq (q_1 + q_n) \sum_{k=1}^n p_k^2 = q_1 + q_n$$

Τετραγωνίζοντας αμφότερα τα μέλη και χρησιμοποιώντας την τετραμμένη ανισότητα $a^2 + b^2 \geq 2ab$, καταλήγουμε στο αποτέλεσμα της (5.6).

Παρατηρώντας το φράγμα (5.5), συμπεραίνουμε ότι για προβλήματα όπου $q_1 \approx q_n$ και άρα $c \approx 0$, η σύγκλιση είναι ταχεία. Όταν όμως $q_n \gg q_1$, που είναι και η πλέον συχνή περίπτωση, τότε $c \approx 1$, και η σύγκλιση είναι πολύ αργή. Συνεπώς η μέθοδος της "οξύτατης πτώσης" δεν είναι κατάλληλη για γενική χρήση και όπως πράγματι θα δούμε υπάρχουν άλλες μέθοδοι με πολύ καλλίτερες ιδιότητες σύγκλισης.

5.3 Προβλήματα

Κεφάλαιο 6

Τεχνικές λεπτομέρειες

6.1 Προσέγγιση παραγώγων

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης για συναρτήσεις συνεχείς και παραγωγίσιμες, στην πλειοψηφία τους χρησιμοποιούν πρώτες ή και δεύτερες παραγώγους. Όταν δεν υπάρχουν διαθέσιμες οι αντίστοιχες αναλυτικές εκφράσεις, τότε είναι δυνατόν να εκτιμηθούν αριθμητικά. Η αριθμητική προσέγγιση των παραγώγων βασίζεται στην ανάπτυξη Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x) + \dots \quad (6.1)$$

και στο θεώρημα της μέσης τιμής:

$$f(x+h) = f(x) + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h^k}{k!}f^{(k)}(x) + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi), \text{ για κάποιο } \xi \in (x, x+h) \quad (6.2)$$

Διάφορες εκφράσεις προκύπτουν που αντιστοιχούν σε εναλλακτικές προσεγγίσεις. Απευθείας έχουμε:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h). \quad (6.3)$$

Επίσης, εάν στην (6.1) θέσουμε όπου h το $-h$ και αφαιρέσουμε κατά μέλη τις δύο εκφράσεις, προκύπτει:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2). \quad (6.4)$$

Εάν δε τις προσθέσουμε κατά μέλη, έχουμε μια προσέγγιση για την δεύτερη παράγωγο:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2). \quad (6.5)$$

Το σφάλμα της προσέγγισης (6.3), που προκύπτει από την θεώρηση ως αμελητέων των όρων υψηλότερης τάξης της ανάπτυξης Taylor, είναι ανάλογο του βήματος h , και πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιώντας την (6.2), δίδεται από την έκφραση $\epsilon_T = \frac{h}{2} f''(\xi)$.

Ένα άλλο σφάλμα είναι αυτό που γίνεται κατά τον υπολογισμό της $f(x)$. Εάν δηλαδή η πραγματική (ακριβής) τιμή είναι $\tilde{f}(x)$ και η υπολογιζόμενη τιμή είναι η $f(x) = \tilde{f}(x) + \epsilon_c$ τότε το σφάλμα υπολογισμού στην (6.3) είναι $\frac{2\epsilon_c}{h}$ το δε συνολικό σφάλμα δίδεται από το άθροισμα:

$$\frac{2\epsilon_c}{h} + \frac{h|f''(\xi)|}{2} \quad (6.6)$$

Το βήμα που ελαχιστοποιεί το συνολικό λάθος (6.6) είναι το πλέον κατάλληλο και δίδεται από: $h^* = 2\sqrt{\frac{\epsilon_c}{|f''(\xi)|}}$.

Περαιτέρω υποθέσεις είναι απαραίτητες για την εκτίμηση του βήματος h^* . Εισάγουμε το σχετικό σφάλμα:

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon_c}{|f(x)|}, \quad \forall f(x) \neq 0$$

και θεωρούμε ότι $f''(\xi) \approx f''(x)$. Επίσης προσεγγίζουμε σε μια πολύ μικρή γειτονιά του x την $f(x) = ax^k$, με $k \geq 2$. Με τις παραπάνω υποθέσεις έχουμε:

$$h^* = 2\sqrt{\frac{x^2\epsilon_r}{k(k-1)}} \approx |x|\sqrt{\epsilon_r} \quad (6.7)$$

Το σχετικό σφάλμα (ελλείψει άλλης πληροφορίας) μπορεί να τεθεί ίσο με την ακρίβεια της μηχανής η . Συνήθως το βήμα που χρησιμοποιείται με την προσέγγιση (6.3) υπολογίζεται από την σχέση $h^* = \max\{1, |x|\}\sqrt{\eta}$, η οποία λαμβάνει υπόψη και την περίπτωση $x = 0$.

Παρόμοια ανάλυση για τις προσεγγίσεις (6.4) και (6.5) καταλήγουν αντιστοίχως στα βήματα $h^* = \max\{1, |x|\}\eta^{1/3}$ και $h^* = \max\{1, |x|\}\eta^{1/4}$.

6.2 Παραγοντοποίηση πινάκων

Η ανάλυση ενός πίνακα σε παράγοντες είναι χρήσιμη σε πολλές εφαρμογές, όπως π.χ. στην επίλυση γραμμικών συστημάτων αλλά και στις μεθόδους βελτιστοποίησης. Εδώ θα ασχοληθούμε με δύο σχήματα. Την παραγοντοποίηση συμμετρικών θετικά ορισμένων πινάκων κατά Cholesky (LL^T και LDL^T) και την παραγοντοποίηση QR .

6.2.1 Ανάλυση Cholesky

Έστω ένας συμμετρικός θετικά ορισμένος $n \times n$ πίνακας A . Η ανάλυση:

$$A = LL^T \quad (6.8)$$

όπου L κάτω τριγωνικός πίνακας, και επίσης η ανάλυση:

$$A = LDL^T \quad (6.9)$$

όπου L κάτω τριγωνικός πίνακας με μονάδες στην διαγώνιο, και D διαγώνιος, ονομάζονται αναλύσεις Cholesky LL^T και LDL^T αντίστοιχα. Ο υπολογισμός των παραγόντων LL^T της περίπτωσης (6.8) γίνεται με απευθείας εξίσωση των στοιχείων του γινομένου LL^T με τα αντίστοιχα του πίνακα A και περιγράφεται από τον παρακάτω αλγόριθμο.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 6.2.1

1. $L_{11}^2 = A_{11}$
 $\forall j = 2, \dots, n$

$$L_{j1} = \frac{A_{j1}}{L_{11}}$$

Τέλος επανάληψης j

2. $\forall i = 2, \dots, n$

$$L_{ii}^2 = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2$$

$$\forall j = i + 1, \dots, n$$

$$L_{ji} = \frac{A_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{jk}L_{ik}}{L_{ii}}$$

Τέλος επανάληψης j

Τέλος επανάληψης i

Αντίστοιχα παρατίθεται ο αλγόριθμος για τον υπολογισμό των LDL^T παραγόντων της περίπτωσης (6.9):

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 6.2.2

$$1. D_{11} = A_{11}$$

$$\forall j = 2, \dots, n$$

$$L_{j1} = \frac{A_{j1}}{D_{11}}$$

Τέλος επανάληψης j

$$2. \forall i = 2, \dots, n$$

$$D_{ii} = A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} D_{kk} L_{ik}^2$$

$$\forall j = i+1, \dots, n$$

$$L_{ji} = \frac{A_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} D_{kk} L_{jk} L_{ik}}{D_{ii}}$$

Τέλος επανάληψης j

Τέλος επανάληψης i

Και οι δύο παραπάνω αλγόριθμοι εκτελούν πράξεις της τάξεως $O(n^3)$. Η ιδιαίτερη (και χρήσιμη) μορφή πίνακα $A_{ij} = \delta_{ij} + v_i v_j$ ή αλλιώς $A = I + vv^T$, μπορεί να αναλυθεί κατά Cholesky μόνο σε $O(n^2)$ πράξεις. Για την ως άνω μορφή οι παράγοντες L υπολογίζονται ως εξής:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 6.2.3

$$\Pi_0 = 1$$

$$\forall i = 1, 2, \dots, n$$

$$L_{ii}^2 = 1 + \frac{v_i^2}{\Pi_{i-1}^2}$$

$$\Pi_i = \Pi_{i-1} L_{ii}$$

$$\forall j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$L_{ij} = \frac{v_i v_j}{\Pi_{i-1}^2 L_{ii}}$$

Τέλος επανάληψης j

Τέλος επανάληψης i

Η παραπάνω τεχνική βρίσκει εφαρμογή στην βελτιστοποίηση στις μεθόδους “Quasi-Newton” όπου η προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα (που διατηρείται ως γινόμενο LL^T) ενημερώνεται με την πρόσθεση ενός πίνακα βαθμού 1, όπως

είναι ο πίνακας vv^T . Εάν λοιπόν $H' = H + vv^T$ και $H = LL^T$, τότε εάν ο πίνακας H' γραφτεί ως $H' = L'L'^T$, έχουμε:

$$L'L'^T = LL^T + vv^T = L(I + ww^T)L^T \quad \text{όπου } Lw = v$$

Στην συνέχεια αναλύεται ο $I + ww^T = L''L''^T$, και προκύπτει ότι $L' = LL''$.

6.2.2 Παραγοντοποίηση QR

Η παραγοντοποίηση ενός τετραγωνικού $n \times n$ πίνακα A ως:

$$A = QR \quad (6.10)$$

όπου Q ορθογώνιος και R πάνω τριγωνικός, χρησιμοποιείται σε πολλές περιπτώσεις, όπως π.χ. στην επίλυση γραμμικών συστημάτων, διαγωνοποίηση πινάκων κλπ. Η ανάλυση σε παράγοντες QR υλοποιείται με διάφορες τεχνικές, όπως με ορθοκανονικοποίηση κατά Gram-Schmidt, με στροφές Jacobi-Givens και με την μέθοδο των ορθογώνιων πινάκων του Householder την οποία και θα περιγράψουμε εν συντομία.

Οι πίνακες Householder έχουν την μορφή:

$$H(u) = I - \frac{2uu^T}{u^T u} \quad (6.11)$$

όπου $u \in R^{(n)}$ και $\|u\| \neq 0$. Παρατηρείστε ότι $H(u)H^T(u) = I$, δηλαδή ο πίνακας $H(u)$ είναι ορθογώνιος και ότι δεν εξαρτάται από το μέτρο του u , αλλά μόνο από την κατεύθυνσή του, δηλαδή ισχύει ότι:

$$H(\lambda u) = H(u), \forall \lambda \neq 0, \lambda \in R \quad (6.12)$$

Επειδή ο $H(u)$ είναι ορθογώνιος αποδεικνύεται εύκολα ότι $\|H(u)a\| = \|a\|$. Ένα καίριο ερώτημα είναι εάν δύο ανύσματα a και b με $\|a\| = \|b\|$, είναι δυνατόν να συσχετισθούν με έναν μετασχηματισμό Householder $H(u)a = b$, και εάν ναι ποιο είναι το κατάλληλο άνυσμα u . Έχουμε:

$$\left(I - \frac{2uu^T}{u^T u}\right)a = b, \text{ και συνεπώς: } u = (a - b) \frac{u^T u}{2u^T a}$$

Συνεπεία της ιδιότητας (6.12), $u = a - b$, που εύκολα μπορεί κανείς να το επιβεβαιώσει λαμβάνοντας υπόψιν ότι $\|a\| = \|b\|$. Μια χρήσιμη ιδιαίτερη περίπτωση

είναι όταν έχουμε $b = re_1$, όπου e_1 το μοναδιαίο διάνυσμα $(1, 0, \dots, 0)^T$, και $r = \pm \|a\|$ ώστε να ισχύει $\|a\| = \|b\|$. Το κατάλληλο Householder άνυσμα είναι $u = a - b = a - re_1$ και ο αντίστοιχος πίνακας του Householder είναι:

$$H(a - re_1) = I - 2 \frac{(a - re_1)(a - re_1)^T}{(a - re_1)^T(a - re_1)} \quad (6.13)$$

Θεωρείστε τον πολλαπλασιασμό των πινάκων: $H_1 A$, όπου $A_{ij} = a_i^{(j)}$, δηλαδή $A = [a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n)}]$ και H_1 ο Householder πίνακας που παράγεται από το άνυσμα $u = a^{(1)} - re_1$. Η πρώτη στήλη του γινομένου ισούται με $H_1 a^{(1)} = \pm \|a^{(1)}\| e_1$, οι δε υπόλοιπες μετασχηματίζονται βάσει του πολλαπλασιασμού χωρίς κάποια ιδιαίτερη δομή. Εφαρμόζουμε την ίδια τακτική στον $(n-1) \times (n-1)$ κάτω δεξιά υποπίνακα του $H_1 A$ και έχουμε τον νέο

$(n-1) \times (n-1)$ πίνακα Householder έστω \bar{H}_2 . Ο πίνακας $H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{H}_2 \end{bmatrix}$

είναι πίνακας Householder και ο πίνακας $H_2 H_1 A$ έχει μηδενικά κάτω από την διαγώνιο στις πρώτες δύο στήλες. Η διαδικασία αυτή συνεχίζεται και τελικά ο πίνακας $H_{n-1} \dots H_2 H_1 A$ είναι πάνω τριγωνικός. Το γινόμενο των πινάκων $H_{n-1} \dots H_2 H_1$ είναι ένας ορθογώνιος πίνακας, έστω Q^T , οπότε έχουμε ότι $Q^T A = R$ και η παραγοντοποίηση $A = QR$ έχει πραγματοποιηθεί.

Μία ιδιαίτερη μορφή πίνακα είναι η $R + wu^T$, όπου R άνω τριγωνικός και $w, u \in R^{(n)}$. Η παραγοντοποίησή του γίνεται με $O(n^2)$ πράξεις, σημαντικά λιγότερες από τις $O(n^3)$ που απαιτούνται για πίνακες χωρίς κάποια ειδική δομή. Τέτοιου είδους πίνακες προκύπτουν κατά την ενημέρωση του Εσσιανού πίνακα που διατηρείται σε παράγοντες QR στις μεθόδους Quasi-Newton. $Q'R' = QR + uu^T = Q(R + wu^T)$, όπου $w = Q^T u$. Η ανάλυση γίνεται με διαδοχικές επίπεδες στροφές (στροφές στον χώρο δύο διαστάσεων). Ο πίνακας στροφής στον δισδιάστατο χώρο καθορίζεται από μια παράμετρο, την γωνία στροφής ϕ , και δίδεται από:

$$S(\phi) \equiv \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

Στον χώρο των n διαστάσεων, η επίπεδη στροφή είναι στροφή που επηρεάζει μόνο δύο άξονες έστω τους i και j . Ο αντίστοιχος πίνακας στροφής $S^{(i,j)}(\phi)_{kl}$ διαφέρει από τον πίνακα μονάδα δ_{kl} , μόνο στα εξής τέσσερα στοιχεία με δείκτες $(k, l) = (i, i), (i, j), (j, i), (j, j)$. Τα τέσσερα αυτά στοιχεία παίρνουν αντίστοιχα τις τιμές $\cos(\phi), -\sin(\phi), \sin(\phi), \cos(\phi)$. Παρατηρούμε ότι $S^T(\phi) = S(-\phi) = S^{-1}(\phi)$ και $S^T(\phi)S(\phi) = I$, δηλαδή ο πίνα-

κας στροφής είναι ορθογώνιος. Έστω ένα διάνυσμα στον χώρο των δύο διαστάσεων $u^T = (u_1, u_2)$. Υπάρχει πάντα ένας πίνακας στροφής $S(\phi)$ τέτοιος ώστε: $S(\phi) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ όπου $v_1 = \pm \|u\|$. Δηλαδή με μια κατάλληλη στροφή μπορούμε να μηδενίσουμε την μία από τις δύο συνιστώσες. Στον χώρο των n διαστάσεων, η επίπεδος στροφή που χαρακτηρίζεται από τις κατευθύνσεις $i-1$ και i , συμβολίζεται ως: $S^{(i-1,i)}(\phi)$. Για κάθε διάνυσμα $w \in R^n$ υπάρχει κατάλληλη γωνία ϕ_i τέτοια ώστε το διάνυσμα $S^{(i-1,i)}(\phi_i)w$ να έχει μηδενική την $i^{\text{οστή}}$ συνιστώσα. Η εφαρμογή $(n-1)$ διαδοχικών στροφών $S^{(1,2)}(\phi_2) \cdots S^{(n-2,n-1)}(\phi_{n-1})S^{(n-1,n)}(\phi_n)$ με κατάλληλες γωνίες ϕ_2, \dots, ϕ_n , μπορεί να μηδενίσει τις συνιστώσες $n, n-1, \dots, 3, 2$ ενός διανύσματος $w \in R^n$. Η εφαρμογή αυτής της στροφής στον πίνακα $R + wu^T$ μετατρέπει τον μεν όρο wu^T σε έναν πίνακα με όλα τα στοιχεία του μηδενικά εκτός αυτών της πρώτης γραμμής, τον δε πίνακα R σε έναν πίνακα άνω Hessenberg, δηλαδή ένα πάνω τριγωνικό πίνακα με επιπλέον μη μηδενικά στοιχεία στην πρώτη δευτερεύουσα διαγώνιο κάτωθεν της κυρίας διαγωνίου. Το άθροισμα των δύο όρων παραμένει να είναι πίνακας άνω Hessenberg. Στην συνέχεια εφαρμόζουμε επιπλέον επίπεδες στροφές έτσι ώστε να μηδενίσουμε τα στοιχεία της δευτερεύουσας διαγωνίου και να καταλήξουμε σε έναν τριγωνικό πίνακα. Αυτό γίνεται εφαρμόζοντας διαδοχικά επίπεδες στροφές στις κατευθύνσεις $i-1$ και i που μηδενίζουν το στοιχείο $(i, i-1)$ για $i = 2, 3, \dots, n$. Έτσι ο αρχικός πίνακας $R + wu^T$ μετά την εφαρμογή των επίπεδων στροφών, που αντιστοιχεί με πολλαπλασιασμό με έναν ορθογώνιο πίνακα, μετατρέπεται σε έναν πάνω τριγωνικό. Η ως άνω διαδικασία απαιτεί $O(n^2)$ πράξεις.

Μέρος II
Λογισμικό Βελτιστοποίησης

Κεφάλαιο 7

Εισαγωγή

Η υλοποίηση των μεθόδων βελτιστοποίησης και η δημιουργία του αντίστοιχου λογισμικού αποτελεί ένα ξεχωριστό κεφάλαιο εξίσου σημαντικό με την ανάπτυξη των αλγορίθμων. Η ανάπτυξη λογισμικών πακέτων ποιότητας αποτελεί δύσκολο και επίπονο έργο και είναι μια χρονοβόρα διαδικασία. Υπάρχουν δύο κύριες φιλοσοφίες:

- Βιβλιοθήκες υποπρογραμμάτων που υλοποιούν διαφορετικούς αλγορίθμους βελτιστοποίησης.
- Ολοκληρωμένα προγράμματα που διαθέτουν και ένα σύστημα επικοινωνίας (διεπαφή χρήσης).

Στην πρώτη κατηγορία, ο χρήστης φροντίζει μέσα από το δικό του πρόγραμμα να χρησιμοποιήσει τα κατάλληλα υποπρογράμματα της βιβλιοθήκης, τα οποία συνήθως έχουν κάποια ομοιομορφία ως προς τον τρόπο κλήσης τους για ευχερέστερη διαχείριση. Επιπλέον και πέραν του κώδικα του σχετιζόμενου με την αντικειμενική συνάρτηση, φροντίζει να παρέχει την είσοδο στα υποπρογράμματα αυτά και να διαχειριστεί την έξοδό τους, γράφοντας τον επιπλέον απαιτούμενο κώδικα.

Αντίθετα στην δεύτερη κατηγορία, από τον χρήστη απαιτείται να παρέχει μόνο το λογισμικό για την αντικειμενική συνάρτηση και πιθανώς για τις μερικές παραγώγους της, η δε διαχείριση γίνεται από το ολοκληρωμένο λογισμικό με την παροχή οδηγιών σε υψηλότερο επίπεδο.

Σε προβλήματα όπου η βελτιστοποίηση δεν είναι το κυρίως μέλημα, αλλά ένα ενδιάμεσο βήμα μιας περιβάλλουσας διαδικασίας, προτιμητέα κατηγορία είναι μάλλον η πρώτη, ιδιαίτερα δε όταν δεν είναι αναγκαίος ο συνδυασμός πολλών αλγορίθμων. Στην άλλη περίπτωση που η βελτιστοποίηση είναι το κυρίως

πρόβλημα, προτιμητέα είναι, στις περισσότερες των περιπτώσεων, η δεύτερη κατηγορία.

Σήμερα υπάρχουν αρκετές εξαιρετικές βιβλιοθήκες προγραμμάτων που περιέχουν και λογισμικό βελτιστοποίησης. Για παράδειγμα αναφέρουμε μερικές:

- NAG (Numerical Algorithms Group) (<http://www.nag.co.uk>)
- GALAHAD (<http://galahad.rl.ac.uk>)
- Lindo (<http://www.lindo.com>)
- IMSL (<http://www.vni.com/products/imsl/>)

Επίσης παραθέτουμε ορισμένα από τα ολοκληρωμένα πακέτα λογισμικού βελτιστοποίησης.

- UNCMIN: R. B. Schnabel, J. E. Koontz, and B. E. Weiss, A modular system of algorithms for unconstrained minimization, ACM Trans. Math. Software 11 (1985), pp. 419–440.
- MINOS: (<http://www.sbsi-sol-optimize.com>)
- MINUIT: (<http://wwwasdoc.web.cern.ch/wwwasdoc/minuit>)
- MERLIN: (<http://merlin.cs.uoi.gr/>)

Το πακέτο *Merlin* έχει αναπτυχθεί στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων και είναι το πακέτο που χρησιμοποιούμε για την εργαστηριακή εκπαίδευση των φοιτητών μας. Στην συνέχεια περιγράφουμε το λογισμικό αυτό και παρέχουμε οδηγίες χρήσης, έτσι ώστε να διευκολυνθεί η χρησιμοποίησή του στο εργαστήριο. Επίσης οι εργαστηριακές ασκήσεις αναμένεται να αντιμετωπιστούν με το εν λόγω λογισμικό. Η σελίδα υποστήριξής του στο διαδίκτυο ανανεώνεται με νέες εκδόσεις, ενημερώσεις και συσχετισμένες ή εξαρτώμενες εφαρμογές.

Βιβλιογραφία

- [Arm66] L. Armijo. Minimization of functions having lipschitz-continuous first partial derivatives. *Pacific J. Math.*, 16:1–3, 1966.
- [Ber95] D. P. Bertsekas. *Nonlinear programming*. Athena Scientific, 1995.
- [Car61] C.W. Carroll. The created response surface technique for optimizing nonlinear restrained systems. *Operations Res.*, 9:169–184, 1961.
- [Cou43] R. Courant. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 49:1–23, 1943.
- [DS96] J. E. Dennis and R. B. Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. SIAM, 1996.
- [Fle95] R. Fletcher. *Practical methods of optimization*. Wiley, second edition, 1995.
- [Fri55] K.R. Frisch. The logarithmic potential method of convex programming. Oslo Univ. Inst. of Economics Memorandum, May 1955.
- [GMW97] P. E. Gill, W. Murray, and M. H. Wright. *Practical Optimization*. Academic Press, 1997.
- [Gol65] A. A. Goldstein. On steepest descent. *SIAM J. Control*, 3:147–151, 1965.
- [NW99] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical optimization*. Springer, 1999.

- [Wol69] P. Wolfe. Convergence conditions for ascent methods. *SIAM Rev.*, 11:226–235, 1969.

Ευρετήριο

- Armijo, 35
Barrier, 17
Cauchy, 47
Cholesky, 55
Dogleg, 47
Fibonacci, 32
Kantorovich ανισότητα, 51
Κυνόπους, 47
Penalty, 15
Powell, 47
Sherman–Morrison–Woodbury, 16
Steepest descent, 50
Wolfe, 35, 43
Wolfe-Powell, 36
Άμεσες μέθοδοι, 49, 50
Αθροίσματα τετραγώνων, 14
Ακρότατα, 11
Αναγκαίες συνθήκες, 10
Ανισοτικοί περιορισμοί, 16
Βήμα Newton, 46
Γραμμική αναζήτηση, 13, 35
Διάστημα αβεβαιότητας, 30
Διχοτόμηση, 33
Ενημέρωση παραγόντων Cholesky, 56
Εσσιανός, 10
Εφικτό σημείο, 14
Ικανές συνθήκες, 11
Ισοτικοί περιορισμοί, 15
Μέθοδοι εμποδίων, 17
Μέθοδοι κλίσης, 49
Μέθοδοι με δεύτερες παραγώγους., 49
Μέθοδοι τιμωρίας, 15
Μέθοδος οξύτατης πτώσης, 50
Μονότροπες συναρτήσεις, 30
Παράγωγος κατεύθυνσης, 13
Παραγοντοποίηση QR, 57
Παραγοντοποίηση πινάκων, 55
Περιορισμοί, 14
Περιοχές εμπιστοσύνης, 45
Σαγμοειδή, 11
Σημείο Cauchy, 47
Τετραγωνικές συναρτήσεις, 12, 45
Φθίνουσα κατεύθυνση, 13
Χρυσή Τομή, 30, 34