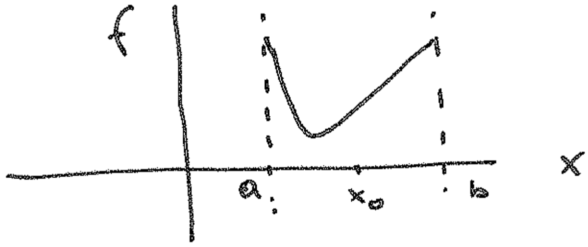
Μονοδιάστατη ἐλαχιστοποίηση.

Θά ὑποθέσουμε ὅτι στό διάστημα $x \in [a,b]$ ἡ $f(x)$ ἔχει μόνον ἕνα ἐλάχιστο, εἶναι δηλαδή "μονότροπος" (unimodal). Γραφικά ἀναπαρίσταται ὡς:



Ὑποθέτουμε ἐπίσης ὅτι ὑπάρχει ἡ παράγωγος $f'(x), x \in [a,b]$

Μια ἁπλή μέθοδος εἶναι ἡ διχοτόμηση.

Διαλέγουμε τό σημεῖο $x_0 = \frac{a+b}{2}$

Ἐάν $f'(x_0) < 0$ τότε θέτουμε: $a_1 = x_0 , b_1 = b$

Ἐάν $f'(x_0) > 0$ τότε θέτουμε: $\alpha_1 = \alpha , b_1 = x_0$

Τό ἀρχικό διάστημα ($|b-a|$ εὔρους...) μίκρυνε στό ἥμισυ:

Ἡ διαδικασία ἐπαναλαμβάνεται στό διάστημα $[a_1, b_1]$ κ.ο.κ. Τό ἐλάχιστο βρίσκεται $x^* \in [a_k, b_k]$ στήν $\underline{k}$ ἐπανάληψη. Ἡ ἀπόσταση ἑνός σημείου $x_k \in [a_k, b_k]$ ἀπό τό x^* εἶναι:

$$|x_k - x^*| \leq b_k - a_k = \frac{b-a}{2^k}$$

$$|x_{k+1} - x^*| \leq b_{k+1} - a_{k+1} = \frac{b-a}{2^{k+1}}$$

$$\frac{\max\limits_{x_{k+1}} |x_{k+1} - x^*|}{\max\limits_{x_k} |x_k - x^*|} = \frac{\frac{b-a}{2^{k+1}}}{\frac{b-a}{2^k}} = \frac{1}{2} \rightarrow \text{γραμμική σύγκλιση.}$$

Μέθοδος N/R.

Ἡ ἀναγκαία συνθήκη γιά τήν ὕπαρξη ἐλαχίστου εἶναι $f'(x^*) = 0$ καί $f''(x^*) \geq 0$.

Ἄρα πρέπει νά βρεθεῖ ἡ λύση τῆς $f'(x^*) = 0$.

Η μέθοδος N/R γιά εὕρεση ριζῶν μιας συνάρτησης $g(x)$ ἔχει ὡς ἑξῆς:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)}$$

Θέτουμε τώρα: $g(x) = f'(x)$ καί ἔχουμε:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$$

Ἀποδεικνύεται ὅτι ὑπό ὁρισμένες προϋποθέσεις ἡ μέθοδος συγκλίνει στήν ρίζα τῆς $f'(x)$ μέ ρυθμό σύγκλισης τετραγωνικό.

Ὑπάρχουν πολλοί ἀλγόριθμοι ἐλαχιστοποίησης σέ μία διάσταση. Πολλοί πηγάζουν ἀπό τήν μέθοδο N/R. π.χ.

$$x_{n+1} = x_n - \alpha f'(x_n) \qquad \alpha > 0$$

ἤ

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{\dfrac{f'(x_n) - f'(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}}$$

ὅπου προσεγγίστηκε ἡ $f''(x_n)$ μέ

Παράγωγοι.

Πολλές φορές δέν ὑπάρχει ὁ κώδικας πού νά ὑλοποιεῖ τήν παράγωγο τῆς συνάρτησης. Ἀναγκαστικά τότε θά πρέπει νά γίνει μία ἐκτίμηση τῆς τιμῆς τῆς παραγώγου ἀριθμητικά.
Ἡ ἐκτίμηση γίνεται μέ βάση τήν ἀνάπτυξη Taylor.

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + O(h^3)$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{1}{2}hf''(x) + O(h^2)$$

Γιά μικρές τιμές τοῦ h ἔχουμε:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + O(h)$$

Ἡ παραπάνω σχέση εἶναι ἡ προσέγγιση μέ πρόσθιες διαφορές.
Τό ἐρώτημα πού τίθεται πλέον ἀναφέρεται στήν τιμή τοῦ h. Ποιό εἶναι τό κατάλληλο h γιά νά ἔχουμε ἀκριβή προσέγγιση!
Ὑπάρχουν δύο πηγές σφαλμάτων. Ἐάν $\underline{\eta}$ ἡ ἀκρίβεια τῆς μηχανῆς τότε $f(x) = \hat{f}(x) \pm \eta|\hat{f}(x)|$ ὅπου $\hat{f}(x)$ ἡ τιμή τῆς f ὑπολογισμένη μέ ἄπειρη ἀκρίβεια. Τό σφάλμα αὐτό εἶναι τό σφάλμα στρογγύλευσης.
Τό ἄλλο σφάλμα προέρχεται ἀπό τήν πρόωρη ἀποκοπή τῆς σειρᾶς Taylor καί εἶναι $O(h) = \left[-\frac{1}{2}f''(x)\right]h$

$$f'(x) \approx \frac{\hat{f}(x+h)-\hat{f}(x) \pm 2\eta|\hat{f}(x)|}{h} - \frac{1}{2}f''(x)h$$

$$= \frac{\hat{f}(x+h)-\hat{f}(x)}{h} \pm \frac{2\eta|\hat{f}(x)|}{h} - \frac{1}{2}f''(x)h$$

Τό σφάλμα είναι λοιπόν συνολικά:

$$E(h) = -\frac{1}{2}f''(x)h \pm \frac{2\eta|\hat{f}(x)|}{h}$$

Τό ἐλάχιστο σφάλμα λαμβάνεται ὅταν:

$$-\frac{1}{2}f''(x) \pm \frac{2\eta}{h^2}|\hat{f}(x)| = 0$$

$$h^2 = \left|\frac{4\eta}{f''(x)}\right| |\hat{f}(x)| \quad \text{ἤ} \quad h \approx 2\sqrt{\frac{\hat{f}(x)}{f''(x)}}\sqrt{\eta}$$

Ἐάν προσεγγίσουμε τοπικά $f(x) = ax^k \Rightarrow f''(x) = k(k-1)ax^{k-2}$

$$h \approx 2\sqrt{\frac{x^2}{k(k-1)}}\sqrt{\eta} \approx |x|\sqrt{\eta}$$

Ἐάν τό $|x| = 0$ $\quad h \approx \sqrt{\eta}$

. . . .

Ἐάν κρατήσουμε ἕναν επιπλέον ὅρο στήν ἀνάπτυξη Taylor ἔχουμε:

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

καί: $\quad f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + O(h^3)$

ἤ: $\quad f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$

ὅπου $O(h^2) = -\dfrac{h^2}{3!}f'''(x)$

Ἀντίστοιχη θεώρηση καταλήγει σέ: $h \approx |x|\eta^{1/3}$ $\quad x \neq 0$

καί $h \approx \eta^{1/3}$ $\quad x = 0$.

Ἡ παραπάνω σχέση γιά τήν παράγωγο είναι ἡ προσέγγιση μέ κεντρικές διαφορές, καί είναι ὑψηλότερης ἀκρίβειας.

Παράγωγος υψηλότερης ακρίβειας.

Έχουμε από τα προηγούμενα:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f'''(x) + O(h^4)$$

Θέτουμε όπου
h το 2h $\Big\}$

$$f'(x) = \frac{f(x+2h) - f(x-2h)}{4h} - \frac{(2h)^2}{3!} f'''(x) + O(h^4)$$

Πολλαπλασιάζουμε την πρώτη με 4 και αφαιρούμε την δεύτερη:

$$3f'(x) = 4\,\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h} + O(h^4)$$

δηλ:

$$f'(x) = \frac{4}{3}\left\{\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}\right\} - \left\{\frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h}\right\} + O(h^4)$$

Αντίστοιχα το βήμα
$$h \approx \begin{cases} |x|\, \eta^{1/5} & |x| \neq 0 \\ \eta^{1/5} & |x| = 0 \end{cases}$$

Συνήθως $h = \max\{1, |x|\}\, \eta^{1/5}$ είναι μιά πρακτική που εφαρμόζεται.

Μέθοδοι Τιμωρίας.

Περιορισμοί ισότητας.

Τό πρόβλημα:

$$\min_x f(x) \quad \text{ὑπό τήν συνθήκη (περιορισμό)} \quad g(x)=0$$

Ἀντιμετωπίζεται ὡς ἑξῆς:

Κατασκευάζεται ἡ συνάρτηση:

$$F(x,\lambda) = f(x) + \lambda[g(x)]^2 \qquad \lambda > 0$$

Θεωροῦμε ὅτι τό λ παίρνει τιμές:
$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k, \dots$ μέ $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_k$

Γιά κάθε τιμή τοῦ $\lambda = \lambda_i$ ἐλαχιστοποιεῖται ἡ $F(x,\lambda_i)$ ὡς πρός x, καί τό x_i^*

χρησιμοποιεῖται ὡς ἀρχικό σημεῖο γιά τήν ἐλαχιστοποίηση τῆς $F(x,\lambda_{i+1})$.

Ἡ διαδικασία αὐτή μηδενίζει τήν $g(x)$ ὁπότε καί θεωροῦμε τό πρόβλημα λυμένο.

<u>Παράδειγμα</u>

$$\min \{x_1^2 + x_2^2\} \quad \text{υπό:} \quad a x_1 + \beta x_2 = \gamma$$

Απλή λύση: $\quad x_2 = \dfrac{\gamma - a x_1}{\beta}$

$$f = x_1^2 + x_2^2 = x_1^2 + \frac{(\gamma - a x_1)^2}{\beta^2} = x_1^2 + \frac{a^2 x_1^2}{\beta^2} - \frac{2a\gamma x_1}{\beta^2} + \frac{\gamma^2}{\beta^2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow \quad 2x_1\left(1 + \frac{a^2}{\beta^2}\right) = \frac{2a\gamma}{\beta^2}$$

$$x_1 = \frac{a\gamma}{a^2+\beta^2} \rightarrow x_2 = \frac{\beta\gamma}{a^2+\beta^2}$$

<u>Λύση με τιμωρία:</u>

$$F(x_1, x_2, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda (a x_1 + \beta x_2 - \gamma)^2$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = 0: \quad (1 + a^2\lambda) x_1 + \lambda a \beta x_2 = \lambda a \gamma$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = 0: \quad \lambda a \beta x_1 + (1 + \beta^2 \lambda) x_2 = \lambda \beta \gamma$$

$$x_1 = \frac{\lambda a \gamma}{1 + (a^2+\beta^2)\lambda}, \quad x_2 = \frac{\lambda \beta \gamma}{1 + (a^2+\beta^2)\lambda}$$

$$\lambda \to \infty \quad x_1 = \frac{a\gamma}{a^2+\beta^2}, \quad x_2 = \frac{\beta\gamma}{a^2+\beta^2}$$