Μέθοδοι Καθολικής και Τοπικής Βελτιστοποίησης

Κωνσταντίνος Βόγκλης
voglis@cs.uoi.gr

11 Ιουνίου 2010

Τμήμα Πληροφορικής Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. **Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση**
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. **Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία**
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. **Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων**
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. **Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα**
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. **Νέο κριτήριο τερματισμού**
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. **Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια**
   2. Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια

Διάρθρωση παρουσίασης

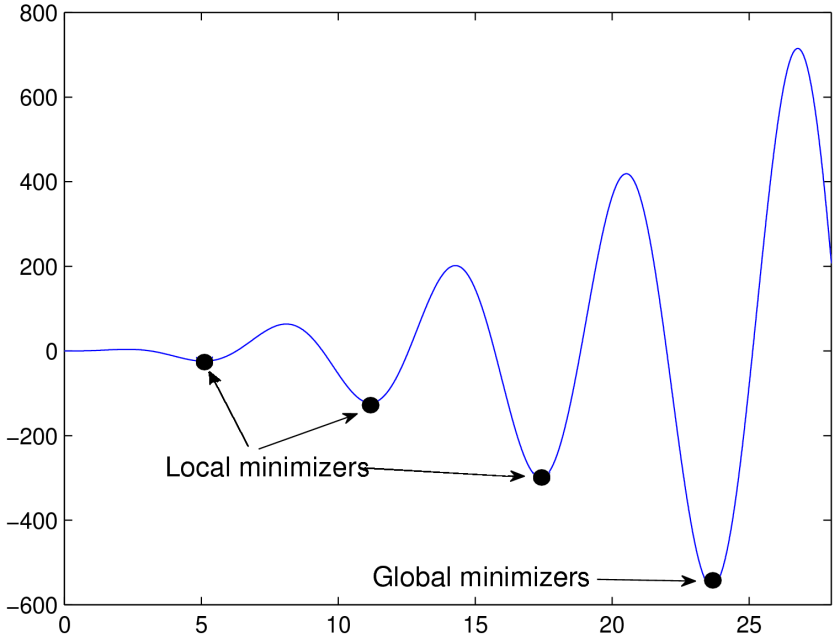
1. Καθολική βελτιστοποίηση
   1. Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
   2. Κατασκευή κατάλληλης κατανομής για δειγματοληψία
   3. Ομαδοποίηση χρησιμοποιώντας φασματική πληροφορία και τον αλγόριθμο καθολικών k-μέσων
   4. Νέα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης μονοτόνως φθίνουσα
   5. Νέο κριτήριο τερματισμού
2. Τοπική βελτιστοποίηση
   1. Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια
   2. **Μέθοδος περιοχών εμπιστοσύνης για προβλήματα μη γραμμικής ελαχιστοποίησης με απλά όρια**

Μαθηματική Διατύπωση

Με τον όρο Βελτιστοποίηση εννοούμε την διαδικασία εύρεσης ελάχιστου σε μια συνάρτηση.
Μαθηματικά το πρόβλημα της βελτιστοποίησης μπορεί να τεθεί ως εξής:

Πρόβλημα της βελτιστοποίησης

$$\min f(x) \quad \text{όπου } x \in S \subset \mathbb{R}^n$$



Καθολικός ελαχιστοποιητής

Ένα σημείο x^* είναι *καθολικός ελαχιστοποιητής* εάν $f(x^*) \leq f(x)$ για όλα τα $x \in S$.

Τοπικός ελαχιστοποιητής

Ένα σημείο x^* είναι *τοπικός ελαχιστοποιητής* εάν υπάρχει μια γειτονιά $\mathcal{N}$ του x^* για την οποία $f(x^*) \leq f(x)$ για όλα $x \in \mathcal{N}$.

Part I

Καθολική Βελτιστοποίηση

Εισαγωγή - Συμβολισμοί

Γενικευμένο πρόβλημα καθολικής βελτιστοποίησης

Εύρεση όλων των ελαχίστων της $f(x)$
όπου : $x \in S \subset \mathbb{R}^n$

Εφαρμογές της καθολικής βελτιστοποίησης

- στη Φυσική (few-body systems, optical systems)
- στη Φαρμακολογία (drug design)
- στη ραδιοθεραπεία (έλεγχος έντασης)
- στην προσαρμογή δεδομένων (πχ. εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων)
- στη μελέτη μοριακών διαμορφώσεων
- σε πολλά τεχνολογικά προβλήματα

Κατηγορίες μεθόδων συνεχούς καθολικής βελτιστοποίησης

- Στοχαστικές ή αιτιοκρατικές μέθοδοι
- Αναζήτησης ενός καθολικού ελαχιστοποιητή ή αναζήτησης όλων (ή μέρους) των ελαχιστοποιητών
- Με ή χωρίς χρήση τοπικής ελαχιστοποίησης

Στην παρούσα διατριβή ασχολούμαστε με:

Στοχαστικές μεθόδους αναζήτησης πολλών ελαχιστοποιητών που χρησιμοποιούν τοπική ελαχιστοποίηση

Στοχαστική μέθοδος με ομαδοποίηση και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Συνεισφορά της διατριβής

Αλγοριθμικό πλαίσιο 1

S1. Ομοιόμορφη δειγματοληψία στο χώρο αναζήτησης
S2. Ομαδοποίηση σημείων και συσχέτισή τους με ελαχιστοποιητές
S3. Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα αντιπροσωπευτικό σημείο κάθε ομάδας
S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Στοχαστική μέθοδος με ομαδοποίηση και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 1

S1. Ομοιόμορφη δειγματοληψία στο χώρο αναζήτησης

S2. **Ομαδοποίηση σημείων και συσχέτισή τους με ελαχιστοποιητές**

S3. Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα αντιπροσωπευτικό σημείο κάθε ομάδας

S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Συνεισφορά της διατριβής

Εφαρμογή φασματικής ανάλυσης και χρήση του αλγορίθμου καθολικών k-μέσων

Στοχαστική μέθοδος με ομαδοποίηση και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 1

S1. Ομοιόμορφη δειγματοληψία στο χώρο αναζήτησης

S2. **Ομαδοποίηση σημείων και συσχέτισή τους με ελαχιστοποιητές**

S3. **Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα αντιπροσωπευτικό σημείο κάθε ομάδας**

S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Συνεισφορά της διατριβής

Εφαρμογή φασματικής ανάλυσης και χρήση του αλγορίθμου καθολικών k-μέσων

Νέα, μονοτόνως φθίνουσα τοπική ελαχιστοποίηση

Στοχαστική μέθοδος με ομαδοποίηση και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 1	Συνεισφορά της διατριβής
S1. Ομοιόμορφη δειγματοληψία στο χώρο αναζήτησης	
S2. **Ομαδοποίηση σημείων και συσχέτισή τους με ελαχιστοποιητές**	**Εφαρμογή φασματικής ανάλυσης και χρήση του αλγορίθμου καθολικών k-μέσων**
S3. **Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα αντιπροσωπευτικό σημείο κάθε ομάδας**	**Νέα, μονοτόνως φθίνουσα τοπική ελαχιστοποίηση**
S4. **Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού**	**Νέο κριτήριο τερματισμού**

Στοχαστική μέθοδος με δειγματοληψία και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Συνεισφορά της διατριβής

Αλγοριθμικό πλαίσιο 2

S1. Δειγματοληψία από προσαρμοστική κατανομή ορισμένη άμεσα ή έμμεσα
S2. Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα σημείο του δείγματος
S3. Ενημέρωση των παραμέτρων της προσαρμοστικής κατανομής
S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Στοχαστική μέθοδος με δειγματοληψία και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 2

S1. **Δειγματοληψία από προσαρμοστική κατανομή ορισμένη άμεσα ή έμμεσα**

S2. Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα σημείο του δείγματος

S3. **Ενημέρωση των παραμέτρων της προσαρμοστικής κατανομής**

S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Συνεισφορά της διατριβής

1. Δειγματοληψία από εμμέσως οριζόμενη κατανομή: Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
2. Δειγματοληψία από κατανομή αναλυτικής μορφής: Άθροισμα κανονικών κατανομών

Στοχαστική μέθοδος με δειγματοληψία και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 2

S1. **Δειγματοληψία από προσαρμοστική κατανομή ορισμένη άμεσα ή έμμεσα**

S2. **Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα σημείο του δείγματος**

S3. **Ενημέρωση των παραμέτρων της προσαρμοστικής κατανομής**

S4. Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Συνεισφορά της διατριβής

1. Δειγματοληψία από εμμέσως οριζόμενη κατανομή: Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
2. Δειγματοληψία από κατανομή αναλυτικής μορφής: Άθροισμα κανονικών κατανομών
Νέα, μονοτόνως φθίνουσα τοπική ελαχιστοποίηση

Στοχαστική μέθοδος με δειγματοληψία και τοπικές ελαχιστοποιήσεις

Αλγοριθμικό πλαίσιο 2

S1. **Δειγματοληψία από προσαρμοστική κατανομή ορισμένη άμεσα ή έμμεσα**

S2. **Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από ένα σημείο του δείγματος**

S3. **Ενημέρωση των παραμέτρων της προσαρμοστικής κατανομής**

S4. **Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού**

Συνεισφορά της διατριβής

1. Δειγματοληψία από εμμέσως οριζόμενη κατανομή: Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση
2. Δειγματοληψία από κατανομή αναλυτικής μορφής: Άθροισμα κανονικών κατανομών
Νέα, μονοτόνως φθίνουσα τοπική ελαχιστοποίηση

Νέο κριτήριο τερματισμού

Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση

Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση

Χαρακτηριστικά της μεθόδου:

- Χρησιμοποιεί εμμέσως μια κατανομή για δειγματοληψία
- Αποφασίζει την εκκίνηση ή μη τοπικής αναζήτησης από σημείο του δείγματος
- Αποθηκεύει τοπικούς ελαχιστοποιητές και σχετιζόμενα στατιστικά στοιχεία
- Εγγυάται ασυμπτωτική σύγκλιση

Περιοχή έλξης

Έστω $\mathcal{L} : R^n \rightarrow R^n$ μια μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης που αντιστοιχίζει ένα αρχικό σημείο σε ένα ελαχιστοποιητή.
Η **περιοχή έλξης** ενός τοπικού ελαχιστοποιητή x_i^* με μια μέθοδο τοπικής ελαχιστοποίησης $\mathcal{L}$ ορίζεται ως:

$$A_i \equiv \{x \in S, \mathcal{L}(x) = x_i^*\}$$

Εάν ο χώρος αναζήτησης S περιέχει συνολικά w τοπικά ελάχιστα, από τον παραπάνω ορισμό προκύπτει:

$$\cup_{i=1}^{w} A_i = S$$

$$m(S) = \sum_{i=1}^{w} m(A_i) \quad \text{για αιτιοκρατική τοπική ελαχιστοποίηση}$$

Ιδανικός αλγόριθμος με χρήση τοπικής ελαχιστοποίησης

S1 Δειγματοληψία ενός σημείου $x \in S$

S2 Βασικό βήμα:

Αν $(x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i)$ Τότε

$$k = k + 1$$

$$y_k = \mathcal{L}(x)$$

S3 Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

Ιδανικός αλγόριθμος με χρήση τοπικής ελαχιστοποίησης

S1 Δειγματοληψία ενός σημείου $x \in S$

S2 Βασικό βήμα:

Αν $(x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i)$ Τότε

$$k = k + 1$$

$$y_k = \mathcal{L}(x)$$

S3 Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού

a) Κάθε ελάχιστο εντοπίζεται μόνο μια φορά
b) Υποθέτουμε ότι η περιοχή έλξης καθορίζεται επακριβώς από τη θέση του ελαχίστου και μόνο

Πρακτική υλοποίηση

- Εφόσον δεν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε επακριβώς τις περιοχές έλξης των ελαχίστων που έχουν ανακαλυφθεί έως τώρα, είναι αδύνατο να αποφανθούμε εάν ένα σημείο ανήκει ή όχι στην ένωσή τους
- Παρόλα αυτά, βάσει ορισμένων υποθέσεων, μπορούμε να εκτιμήσουμε την αντίστοιχη πιθανότητα

Στοχαστική τροποποίηση του Ιδανικού αλγορίθμου:

S2 Βασικό βήμα:

Υπολογισμός της πιθανότητας p ώστε $x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i$

Με πιθανότητα p εκτέλεσε τα παρακάτω βήματα

$$y = \mathcal{L}(x)$$

Αν ($y \notin \{y_i, i = 1, 2, \ldots, k\}$) Τότε

$$k = k + 1$$

$$y_k = y$$

Πρακτική υλοποίηση

- **Εφόσον δεν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε επακριβώς τις περιοχές έλξης των ελαχίστων που έχουν ανακαλυφθεί έως τώρα, είναι αδύνατο να αποφανθούμε εάν ένα σημείο ανήκει ή όχι στην ένωσή τους**
- Παρόλα αυτά, βάσει ορισμένων υποθέσεων, μπορούμε να εκτιμήσουμε την αντίστοιχη πιθανότητα

Στοχαστική τροποποίηση του Ιδανικού αλγορίθμου:

S2 Βασικό βήμα:

Υπολογισμός της πιθανότητας p ώστε $x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i$

Με πιθανότητα p εκτέλεσε τα παρακάτω βήματα

$y = \mathcal{L}(x)$

Αν ($y \notin \{y_i, i = 1, 2, \ldots, k\}$) Τότε

$k = k + 1$

$y_k = y$

Πρακτική υλοποίηση

- Εφόσον δεν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε επακριβώς τις περιοχές έλξης των ελαχίστων που έχουν ανακαλυφθεί έως τώρα, είναι αδύνατο να αποφανθούμε εάν ένα σημείο ανήκει ή όχι στην ένωσή τους
- **Παρόλα αυτά, βάσει ορισμένων υποθέσεων, μπορούμε να εκτιμήσουμε την αντίστοιχη πιθανότητα**

Στοχαστική τροποποίηση του Ιδανικού αλγορίθμου:

S2 Βασικό βήμα:

Υπολογισμός της πιθανότητας p ώστε $x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i$

Με πιθανότητα p εκτέλεσε τα παρακάτω βήματα

$$y = \mathcal{L}(x)$$

Αν ($y \notin \{y_i, i = 1, 2, \ldots, k\}$) Τότε

$$k = k + 1$$

$$y_k = y$$

Πρακτική υλοποίηση

- Εφόσον δεν είναι δυνατόν να γνωρίζουμε επακριβώς τις περιοχές έλξης των ελαχίστων που έχουν ανακαλυφθεί έως τώρα, είναι αδύνατο να αποφανθούμε εάν ένα σημείο ανήκει ή όχι στην ένωσή τους
- Παρόλα αυτά, βάσει ορισμένων υποθέσεων, μπορούμε να εκτιμήσουμε την αντίστοιχη πιθανότητα

Στοχαστική τροποποίηση του Ιδανικού αλγορίθμου:

S2 Βασικό βήμα:

Υπολογισμός της πιθανότητας p ώστε $x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i$

Με πιθανότητα p εκτέλεσε τα παρακάτω βήματα

$$y = \mathcal{L}(x)$$

Αν ($y \notin \{y_i, i = 1, 2, \ldots, k\}$) Τότε

$$k = k + 1$$

$$y_k = y$$

Εκτίμηση πιθανότητας

- Υπερεκτίμηση της πιθανότητας ($p \to 1$), μετατρέπει τον αλγόριθμο σε μέθοδο πολλαπλών εκκινήσεων (Multistart) και συνεπώς αυξάνει το υπολογιστικό κόστος
- Υποεκτίμηση της πιθανότητας ($p \to 0$), οδηγεί σε επαναλαμβανόμενη δειγματοληψία χωρίς εφαρμογή τοπικής αναζήτησης και με μηδαμινό υπολογιστικό κόστος

Πιθανοτικό Μοντέλο: Βασική αρχή

Αν ένα σημείο x του δείγματος βρίσκεται πλησίον ήδη γνωστού ελαχιστοποιητού y_i, τότε η πιθανότητα το σημείο να μην ανήκει στην περιοχή έλξης του, είναι μικρή και τείνει στο μηδέν αν τα σημεία x και y_i συμπίπτουν

$$Pr(x \notin A_i) \xrightarrow[|x-y_i| \longrightarrow 0]{} 0$$

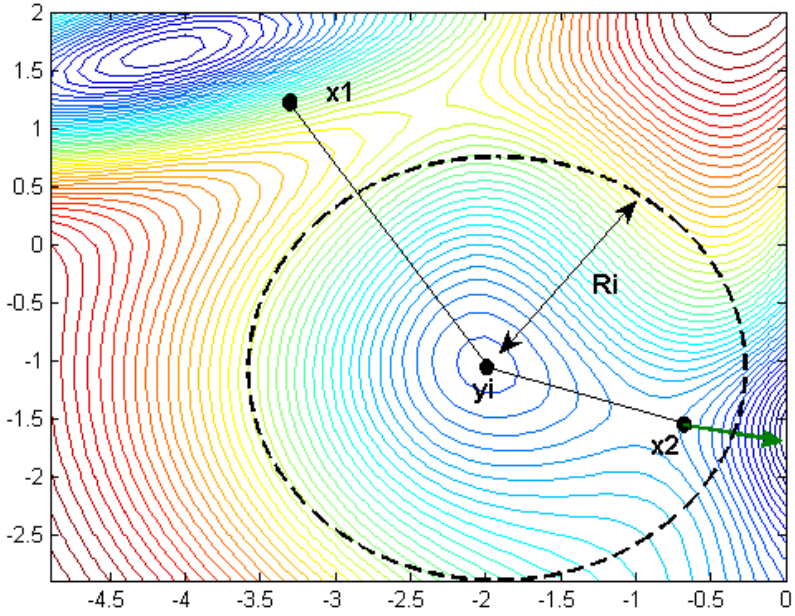
Πιθανοτικό μοντέλο (συνέχεια)

Ορίζουμε την *μέγιστη ακτίνα έλξης(Maximum Attraction Radius)* ως:

$$R_i = \max_j \{||x_j^{(i)} - y_i||\}$$

όπου $x_j^{(i)}$ είναι τα σημεία του δείγματος που οδήγησαν (μετά από τοπική αναζήτηση) στο i^{th} ελαχιστοποιητή y_i.
Έστω x ένα νέο σημείο του δείγματος:

- Αν $||y_i - x|| > R_i$, τότε $Pr(x \notin A_i) = 1$
- Διαφορετικά
  - Αν $\nabla f(x)^T(y_i - x) \geq 0$ (η διεύθυνση από το x στο y_i είναι αύξουσα) τότε $Pr(x \notin A_i) = 1$
  - Διαφορετικά εκτίμησε την πιθανότητα $p \approx Pr(x \notin A_i)$



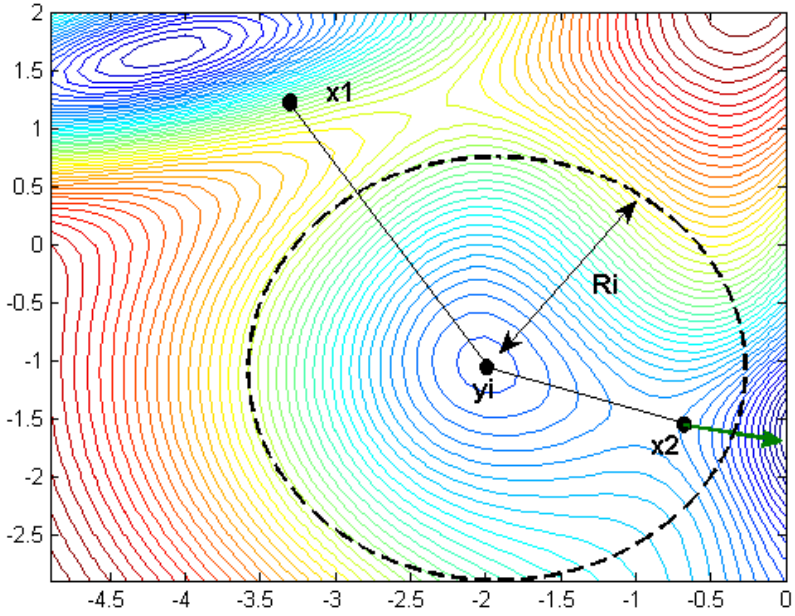
Πιθανοτικό μοντέλο (συνέχεια)

Ορίζουμε την *μέγιστη ακτίνα έλξης(Maximum Attraction Radius)* ως:

$$R_i = \max_j \{||x_j^{(i)} - y_i||\}$$

όπου $x_j^{(i)}$ είναι τα σημεία του δείγματος που οδήγησαν (μετά από τοπική αναζήτηση) στο i^{th} ελαχιστοποιητή y_i.
Έστω x ένα νέο σημείο του δείγματος:

- **Αν** $||y_i - x|| > R_i$**, τότε** $Pr(x \notin A_i) = 1$
- **Διαφορετικά**
  - Αν $\nabla f(x)^T(y_i - x) \geq 0$ (η διεύθυνση από το x στο y_i είναι αύξουσα) τότε $Pr(x \notin A_i) = 1$
  - Διαφορετικά εκτίμησε την πιθανότητα $p \approx Pr(x \notin A_i)$



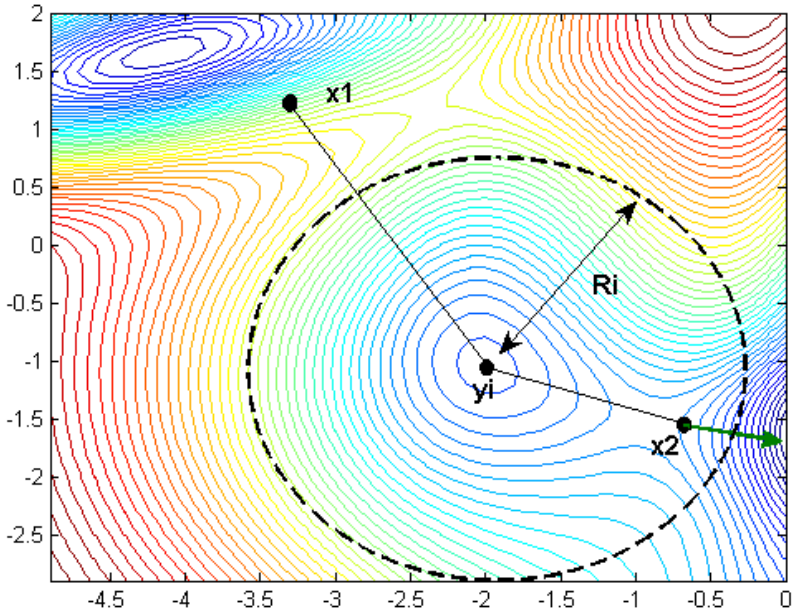
Πιθανοτικό μοντέλο (συνέχεια)

Ορίζουμε την *μέγιστη ακτίνα έλξης(Maximum Attraction Radius)* ως:

$$R_i = \max_j \{||x_j^{(i)} - y_i||\}$$

όπου $x_j^{(i)}$ είναι τα σημεία του δείγματος που οδήγησαν (μετά από τοπική αναζήτηση) στο i^{th} ελαχιστοποιητή y_i.
Έστω x ένα νέο σημείο του δείγματος:

- Αν $||y_i - x|| > R_i$, τότε $Pr(x \notin A_i) = 1$
- Διαφορετικά
  - **Αν** $\nabla f(x)^T(y_i - x) \geq 0$ **(η διεύθυνση από το** x **στο** y_i **είναι αύξουσα) τότε** $Pr(x \notin A_i) = 1$
  - **Διαφορετικά εκτίμησε την πιθανότητα** $p \approx Pr(x \notin A_i)$



Πιθανοτικό μοντέλο (συνέχεια)

Πιθανοτικό μοντέλο

Έστω $z = \frac{||y-x||}{R}$ και l αριθμός των επαναλήψεων που κατέληξαν στον ελαχιστοποιητή y.

$$Pr(x \notin A(y)) = \begin{cases} 1, \text{ αν } z > 1 \text{ ή } \nabla f(x)^T(y-x) \geq 0 \\ p_g \cdot \phi(z,l), \text{ διαφορετικά} \end{cases}$$

,

$\phi(z,l)$ έχει τις ιδιότητες

$$\lim_{z_i \to 0} \phi(z,l) \to 0$$

$$\lim_{z \to 1} \phi(z,l) \to 1$$

$$\lim_{l \to \infty} \phi(z,l) \to 0$$

$$0 < \phi(z,l) < 1$$

$$p_g = \left[1 + \frac{(y-x)^T \nabla f(x)}{||y-x|| \cdot ||\nabla f(x)||}\right]$$ ένα παράγοντας μείωσης τέτοιος ώστε:

$$p_g \to 0 \text{ όσο } \frac{(y-x)^T \nabla f(x)}{||y-x|| \cdot ||\nabla f(x)||} \to -1$$

Το μοντέλο $\phi(z, l)$

Ορίσαμε το μοντέλο $\phi(z, l)$ ως:

$$\phi(z, l) = ze^{-l^2(z-1)^2}, \ \forall z \in (0, 1)$$

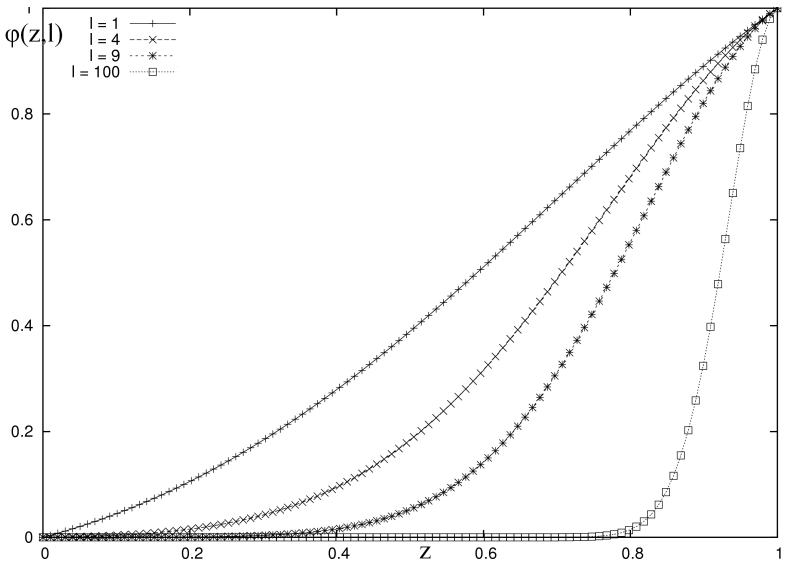
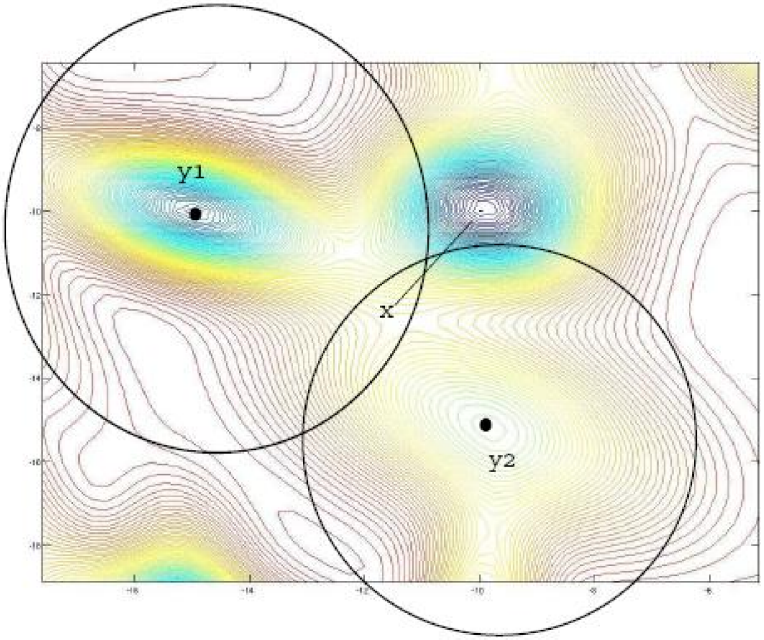
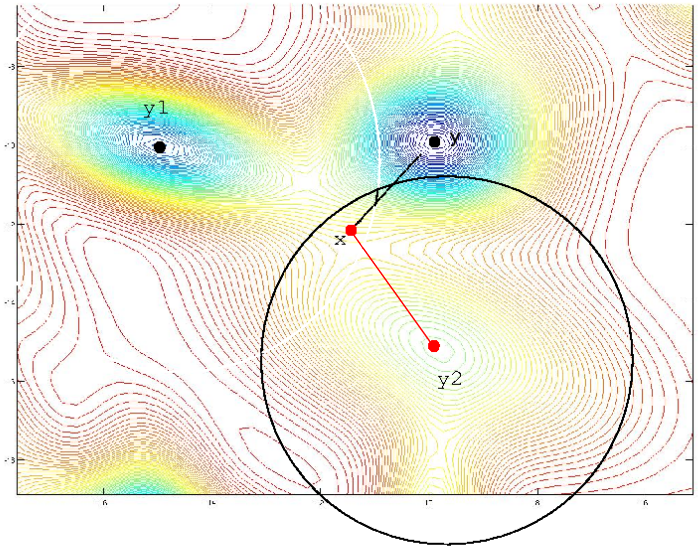


Figure: Η τιμή του μοντέλου $\phi(z, l)$ για $z \in [0, 1]$ για αυξανόμενες τιμές $l = 1, 4, 9, 100$

Τελική απόφαση για πολλούς ελαχιστοποιητές

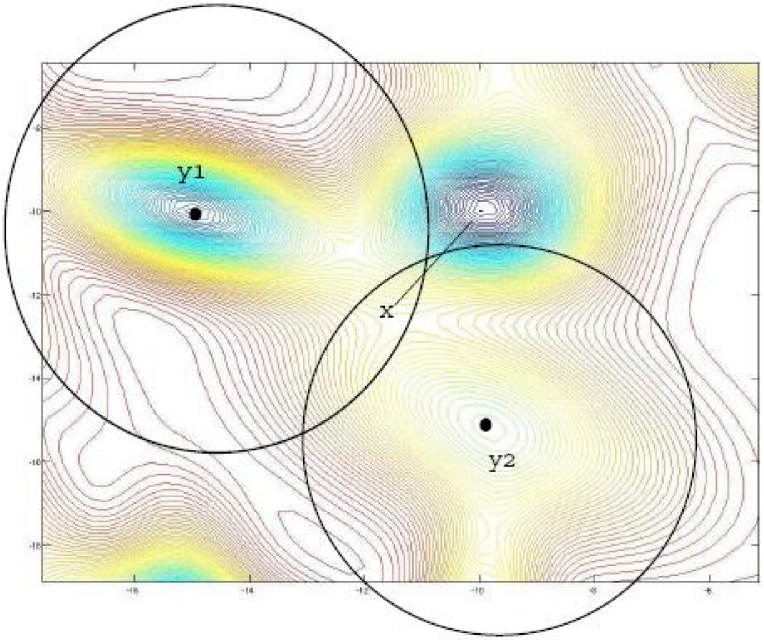
- $p = Pr(x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i) = \prod_{i=1}^{k} Pr(x \notin A_i)$
- Προσέγγιση του παραπάνω: Σε περίπτωση πολλών ελαχίστων που ικανοποιούν τη συνθήκη $||y_i - x|| \leq R_i$ ελέγχουμε ένα-ένα ξεκινώντας από το κοντινότερο έως ότου αποφασιστεί να πραγματοποιηθεί μια τοπική ελαχιστοποίηση

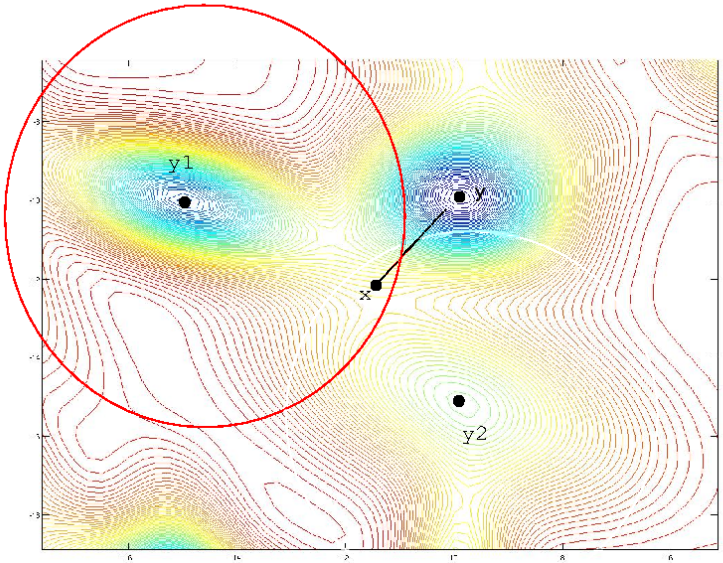




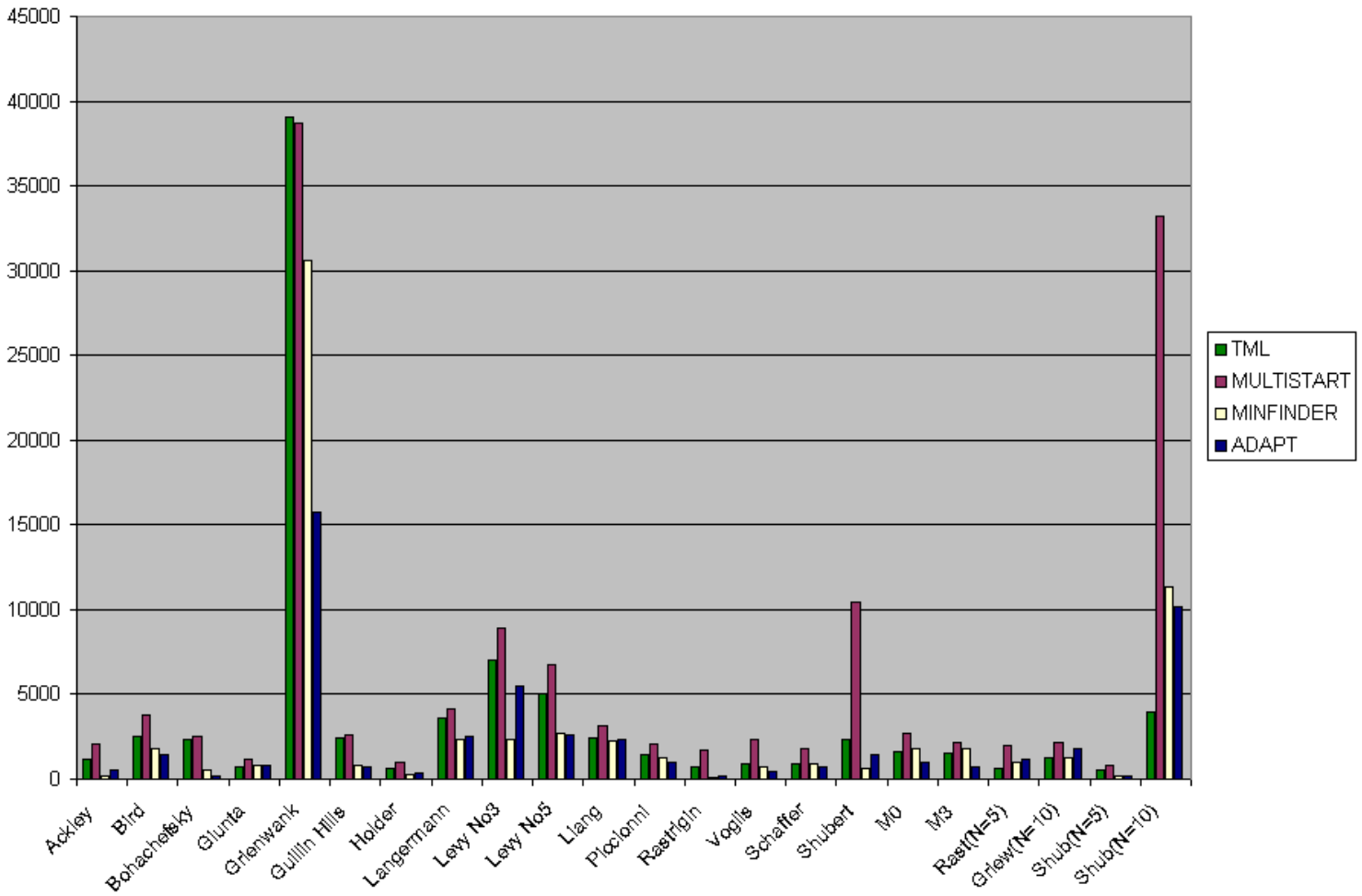
Τελική απόφαση για πολλούς ελαχιστοποιητές

- $p = Pr(x \notin \cup_{i=1}^{k} A_i) = \prod_{i=1}^{k} Pr(x \notin A_i)$
- Προσέγγιση του παραπάνω: Σε περίπτωση πολλών ελαχίστων που ικανοποιούν τη συνθήκη $||y_i - x|| \leq R_i$ ελέγχουμε ένα-ένα ξεκινώντας από το κοντινότερο έως ότου αποφασιστεί να πραγματοποιηθεί μια τοπική ελαχιστοποίηση





Πειραματικά αποτελέσματα



Δειγματοληψία από άθροισμα κανονικών κατανομών

Το μοντέλο δειγματοληψίας αθροίσματος κανονικών κατανομών

Εάν y_i τοπικός ελαχιστοποιητής, αντιστοιχείται η κατανομή:

$$N(x; \mu_{y_i}, \Sigma_{y_i}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{|\Sigma_{y_i}|} e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_{y_i})^T \Sigma_{y_i}^{-1} (x-\mu_{y_i})}$$

όπου μ_{y_i} = η μέση τιμή και Σ_{y_i} = ο πίνακας συμμεταβλητότητας της κατανομής.
Δοθέντων N σημείων $x_1, x_2, \ldots x_N$ από τα οποία η τοπική αναζήτηση κατέληξε στο y_i, υπολογίζουμε τις ποσότητες μ και Σ ως:

$$\begin{aligned} \mu_{y_i} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \\ \Sigma_{y_i} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \mu_{y_i})(x_i - \mu_{y_i})^T \end{aligned}$$

Το μοντέλο δειγματοληψίας αθροίσματος κανονικών κατανομών (συνέχεια)

Για k ελάχιστα η κατανομή πιθανότητας διαμορφώνεται ως:

$$\mathcal{N}(x) = \sum_{i=1}^{k} \eta_i N(x; \mu_{y_i}, \Sigma_{y_i})$$

όπου $\eta_i = \frac{l_i}{\sum_{l_i}}$, και l_i ο αριθμός επαναλήψεων που κατέληξαν στο y_i.

Κατανομή Δειγματοληψίας

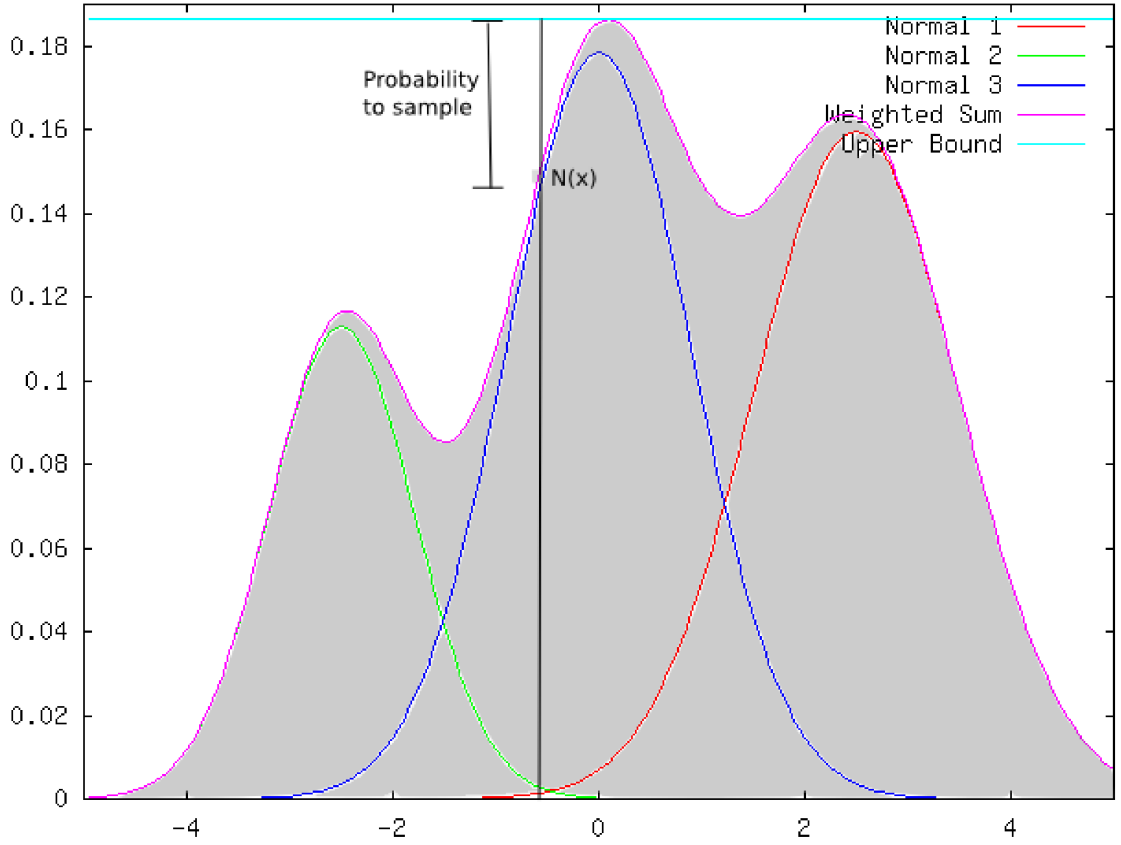


Figure: Μονοδιάστατη περίπτωση 3 ελάχιστα

Ακολουθιακή ενημέρωση παραμέτρων

Έστω ένα αρχικό σημείο x που οδηγεί στο ελάχιστο y_i μέσω της $\mathcal{L}(x) = y_i$

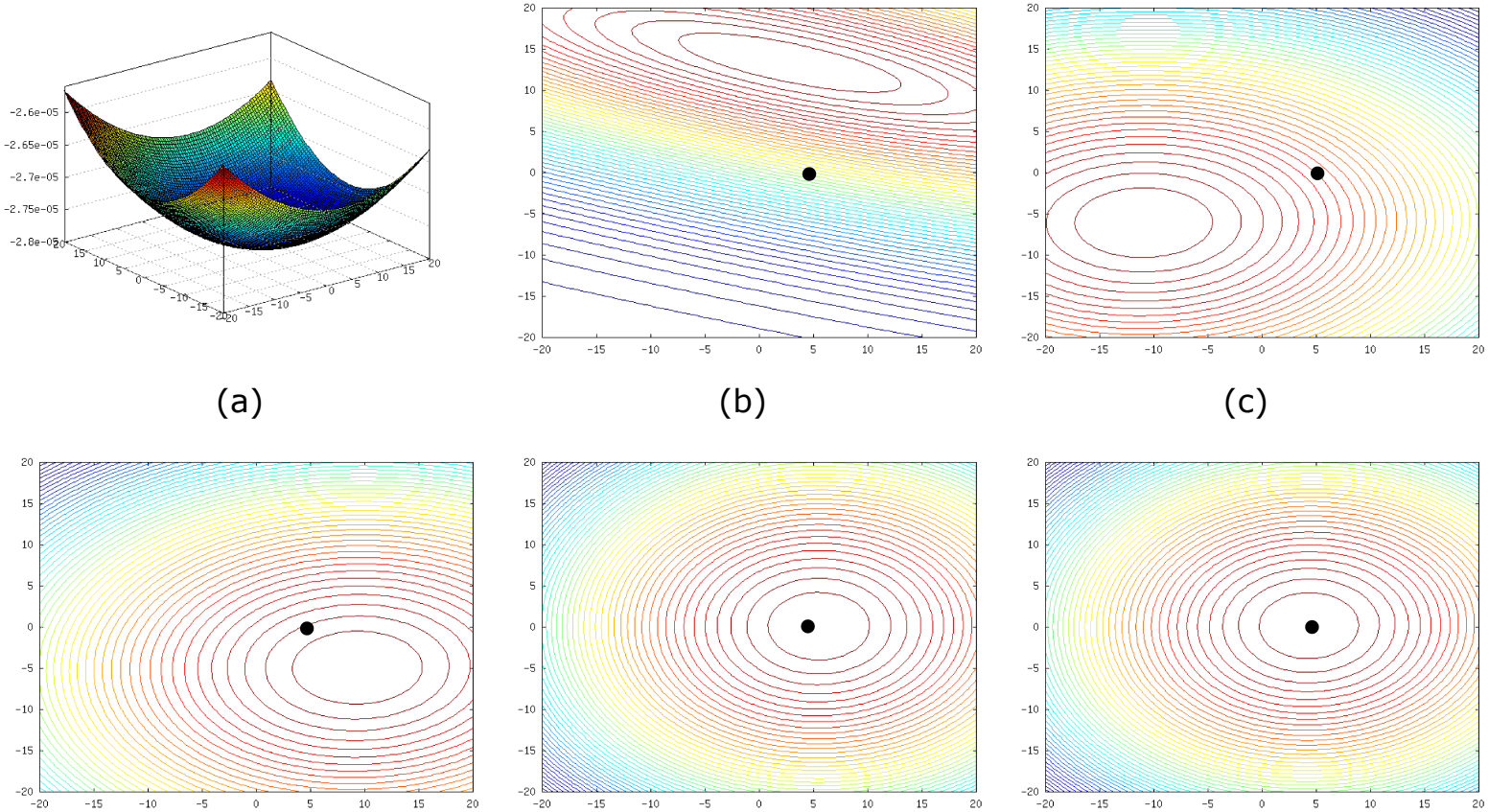
- $\tilde{\mu}_{y_i} \leftarrow \mu_{y_i} + \alpha_i(x - \mu_{y_i})$
- $\tilde{\Sigma}_{y_i} \leftarrow \Sigma_{y_i} + \alpha_i(x - \mu_{y_i})(x - \mu_{y_i})^T$,

where $\alpha_i \in (0, 1)$.

Η ποσότητα α_i είναι ένας παράγοντας μάθησης:
Αρχικοποίηση:

- Αρχικοποίησε το μ_{y_i}
- Αρχικοποίησε το Σ_{y_i}

Παράδειγμα ακολουθιακής ενημέρωσης των παραμέτρων της κατανομής



Παράδειγμα της κατανομής γύρω από ένα ελάχιστο

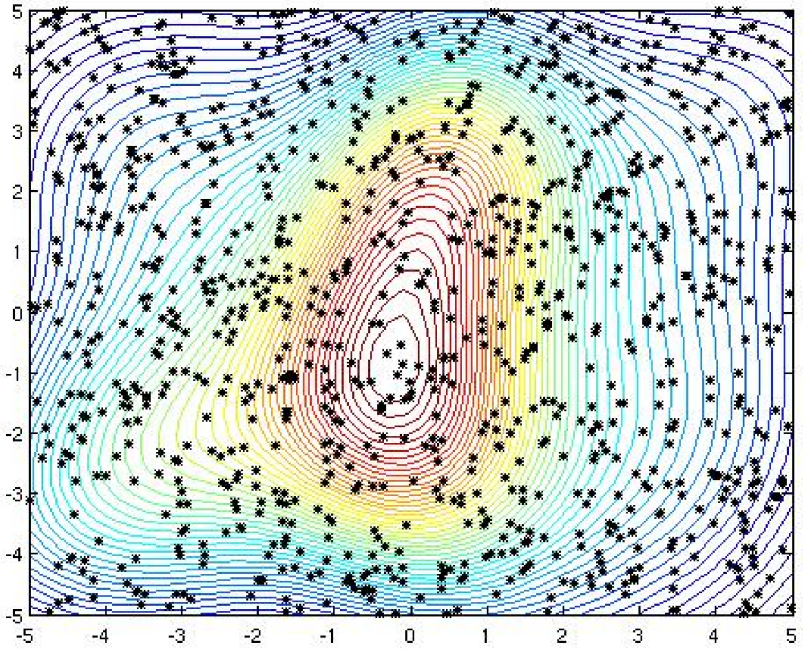


Figure: Δειγματοληψία με ομοιόμορφη κατανομή

Παράδειγμα της κατανομής γύρω από ένα ελάχιστο

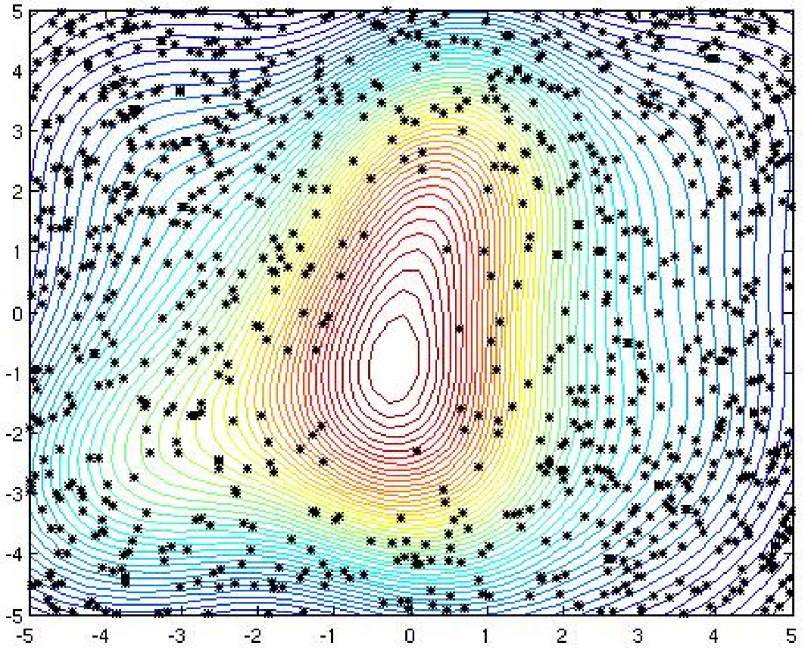


Figure: Δειγματοληψία με την προτεινόμενη κατανομή

Παράδειγμα της κατανομής για πολλά ελάχιστα

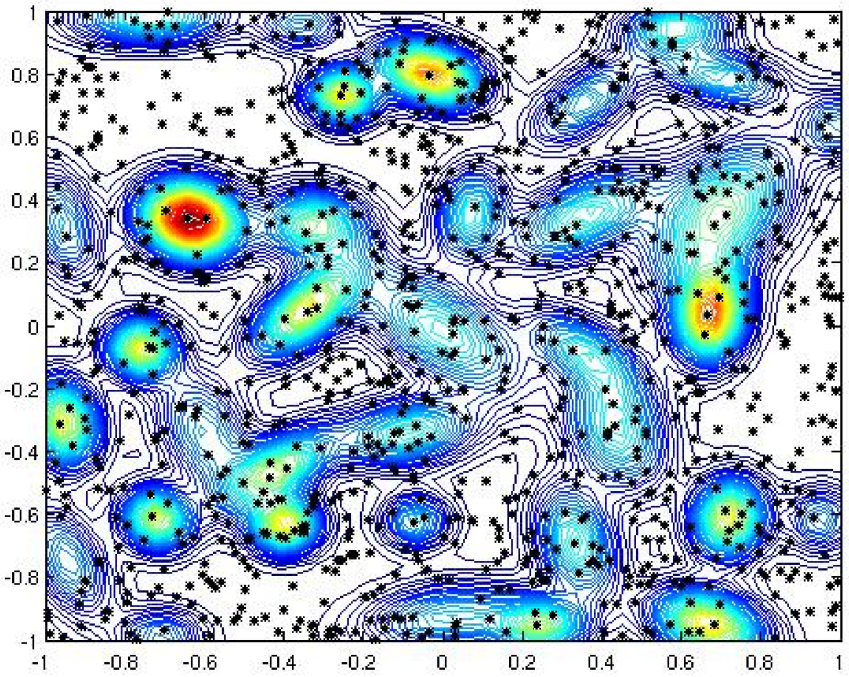


Figure: Δειγματοληψία με ομοιόμορφη κατανομή

Παράδειγμα της κατανομής για πολλά ελάχιστα

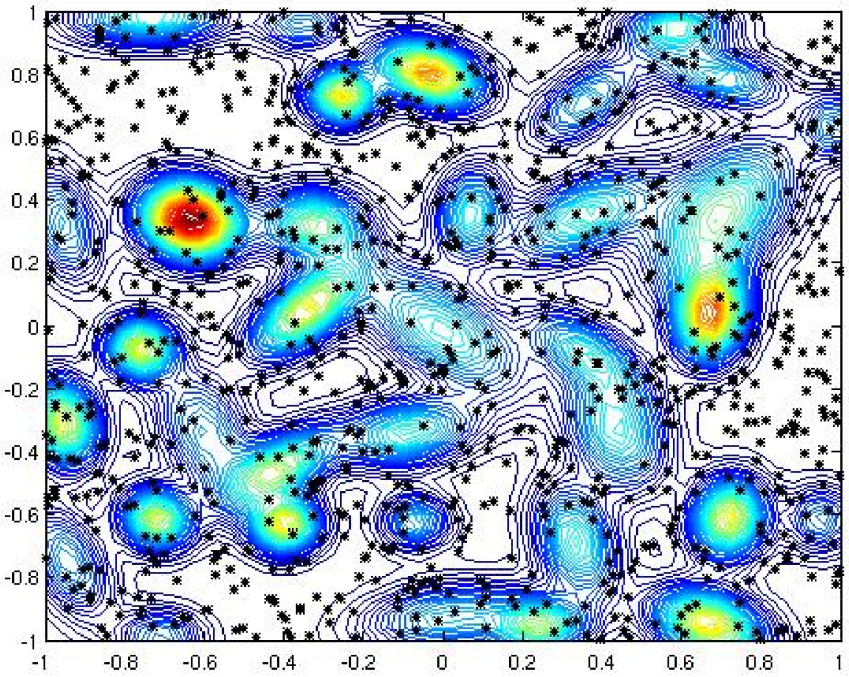
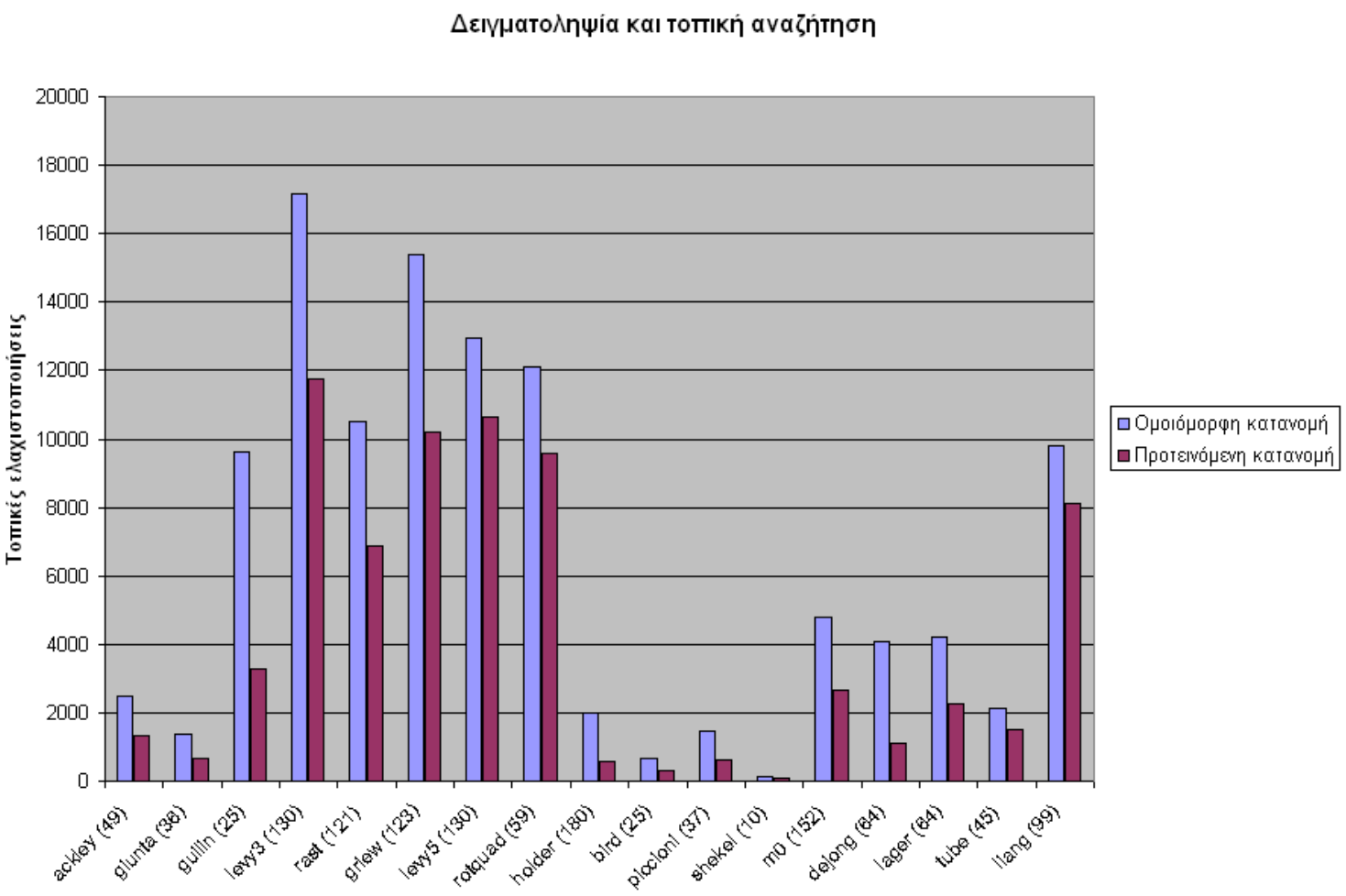


Figure: Δειγματοληψία με την προτεινόμενη κατανομή

Πειραματικά αποτελέσματα



Ομαδοποίηση βασισμένη σε φασματική πληροφορία

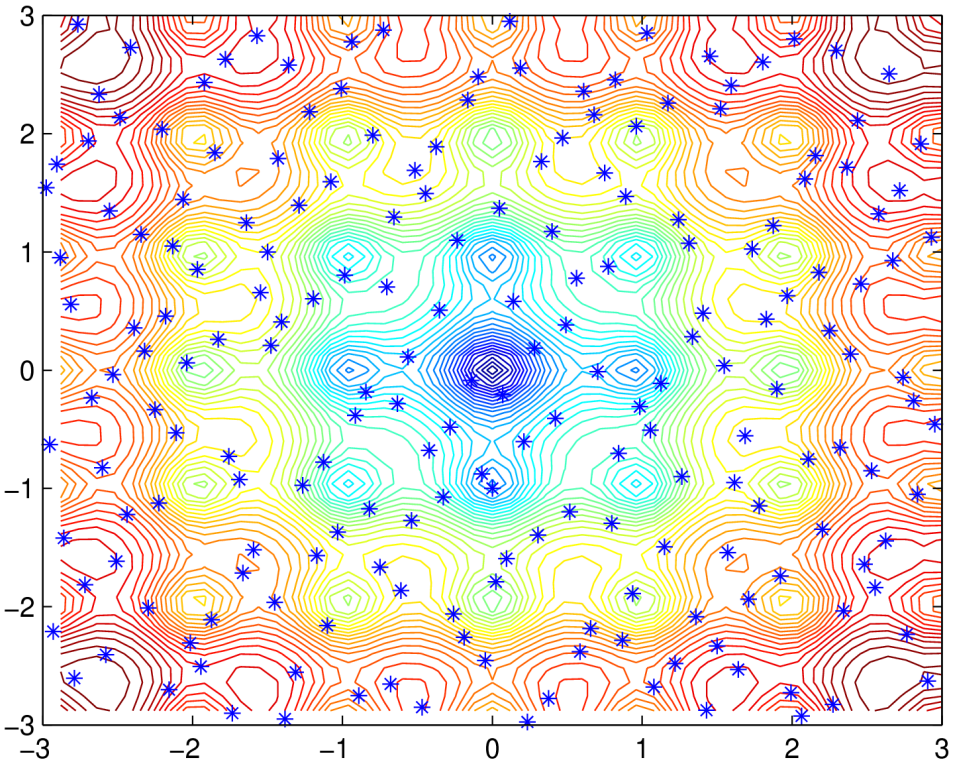
Προτεινόμενη ομαδοποίηση

Έστω M τυχαία σημεία στο χώρο αναζήτησης

- Βήμα 1(Συγκέντρωση σημείων): Μικρή μετακίνηση των αρχικών σημείων σε φθίνουσες κατευθύνσεις
- Βήμα 2(Εκτίμηση του αριθμού των ομάδων k): Χρησιμοποιώντας **εμπλουτισμένη** φασματική πληροφορία
- Βήμα 3(Ομαδοποίηση): Εφαρμογή του αλγορίθμου καθολικών k-μέσων (ή παραλλαγής του)
- Βήμα 4(Υπολογισμός ελαχίστων): Εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης από τα κέντρα των ομάδων

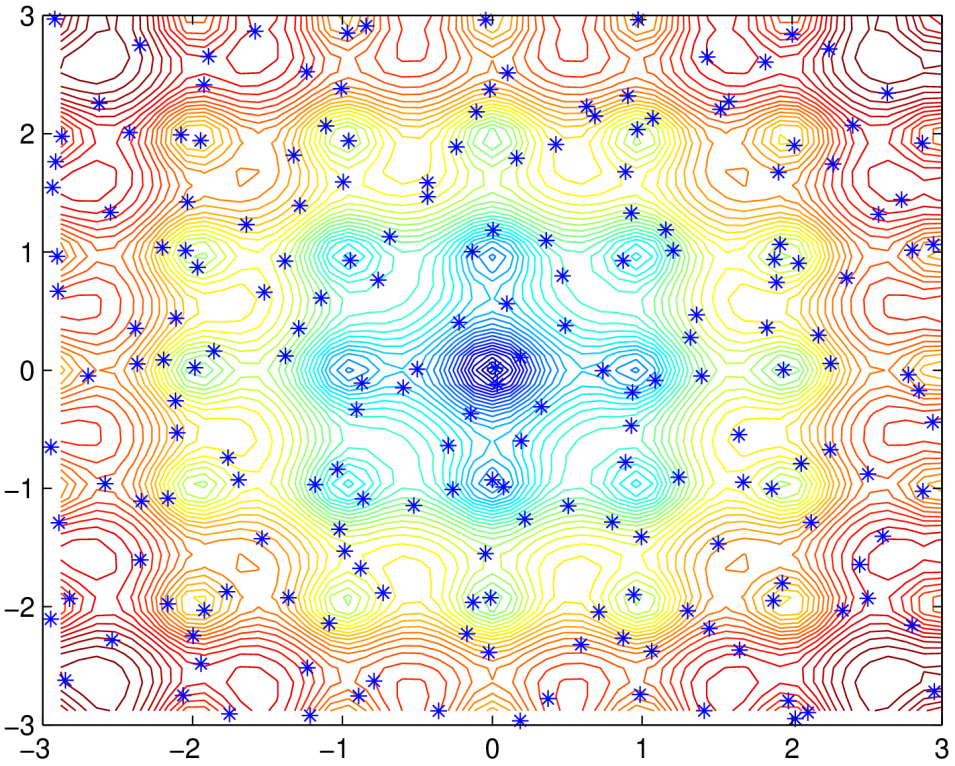
Δημιουργία συγκεντρώσεων στο χώρο αναζήτησης :

- Μικρά βήματα αντίθετα στην διεύθυνση της παραγώγου



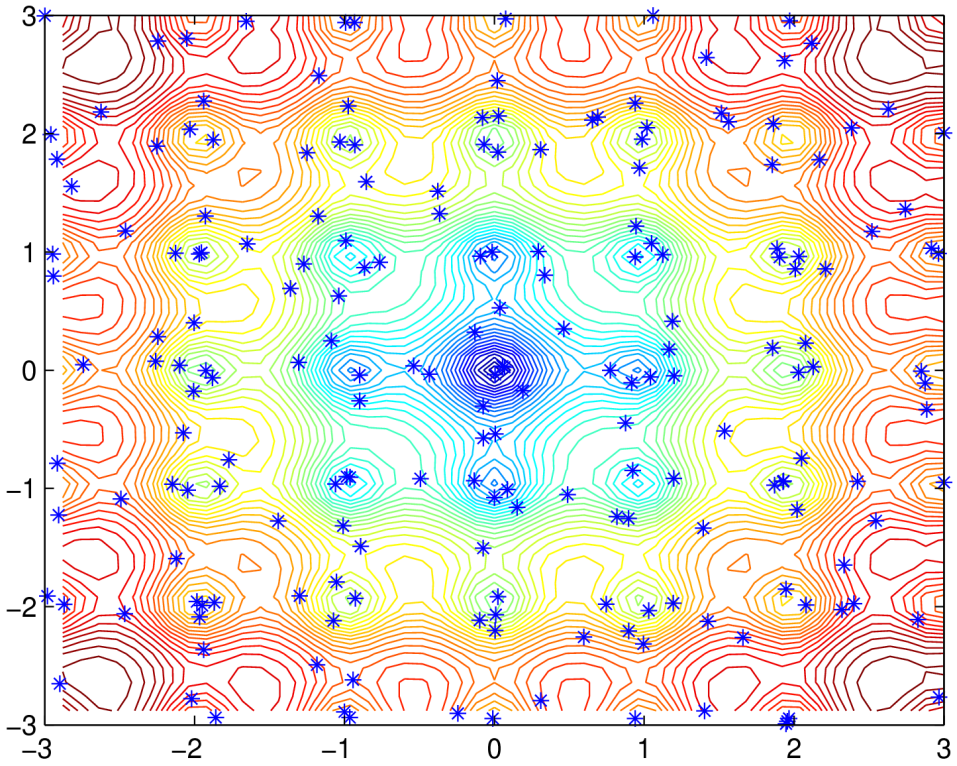
Δημιουργία συγκεντρώσεων στο χώρο αναζήτησης :

- Μικρά βήματα αντίθετα στην διεύθυνση της παραγώγου



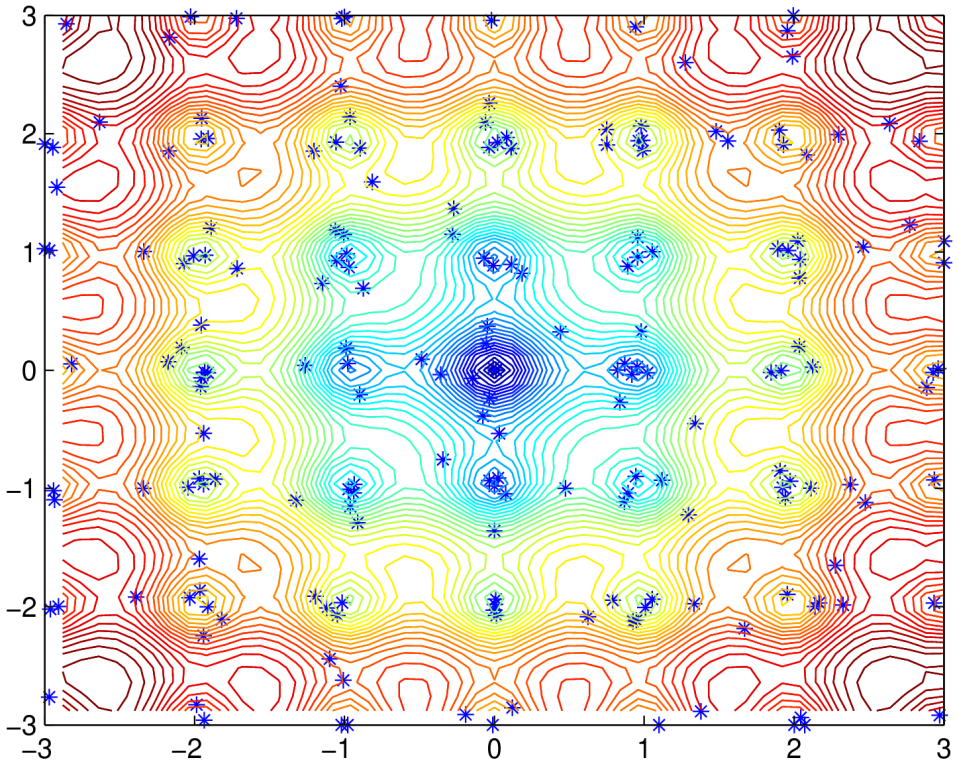
Δημιουργία συγκεντρώσεων στο χώρο αναζήτησης :

- Μικρά βήματα αντίθετα στην διεύθυνση της παραγώγου



Δημιουργία συγκεντρώσεων στο χώρο αναζήτησης :

- Μικρά βήματα αντίθετα στην διεύθυνση της παραγώγου



Εκτίμηση του αριθμού των ομάδων k: Φασματική ανάλυση

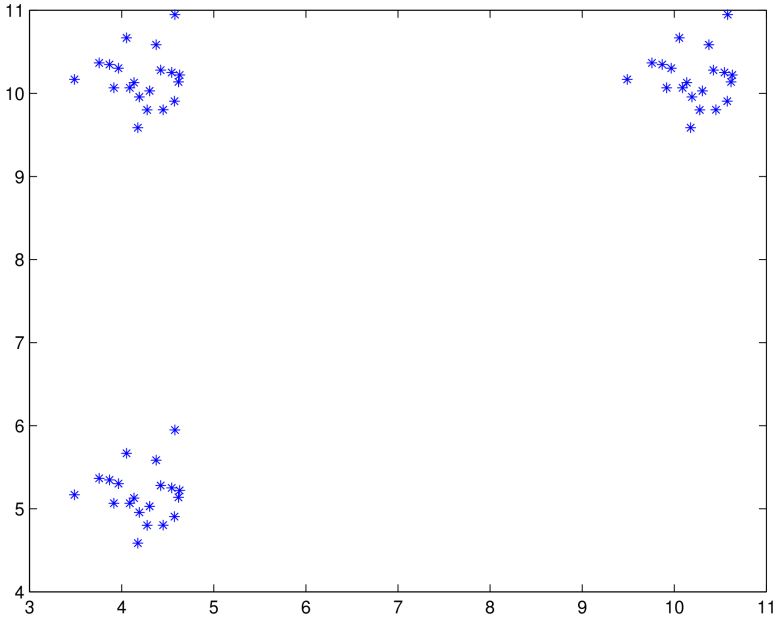
Αλγόριθμος φασματικής ανάλυσης

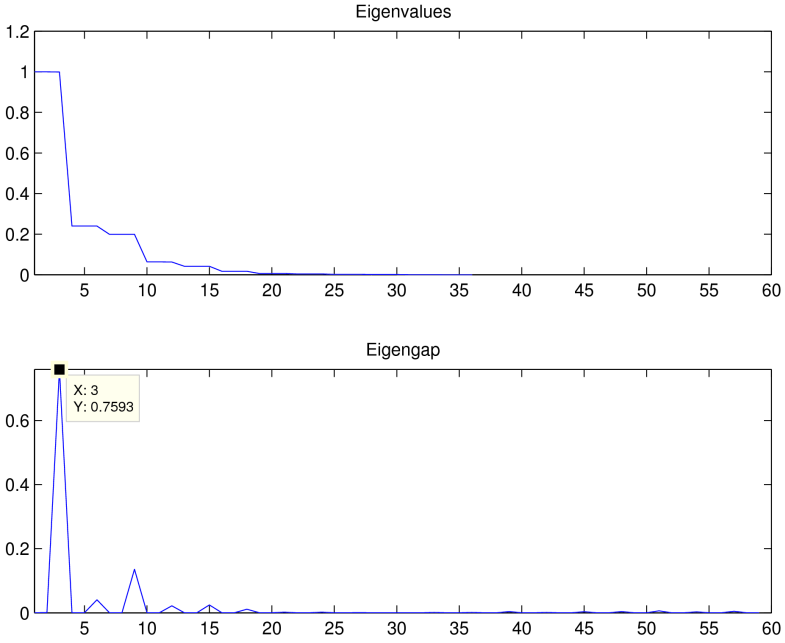
Έστω M τυχαία σημεία, μετά το βήμα συγκέντρωσης.

1. Δημιουργία πίνακα συσχέτισης : $A_{ij} = exp(-||x_i - x_j||^2/2\sigma^2)$
2. Κανονικοποίηση του πίνακα συσχέτισης:
   - Δημιουργία διαγώνιου πίνακα $D = \sum_{i=1}^{M} A_{ii}$
   - Δημιουργία κανονικοποιημένου πίνακα $L = D^{-1/2}AD^{-1/2}$
3. Υπολογισμός και ταξινόμηση των ιδιοτιμών του L. Έστω $e_1, e_2, \ldots, e_M$ οι ταξινομημένες ιδιοτιμές
4. Υπολογισμός διαφορών $\delta_i = e_{i+1} - e_i, i = 1, \ldots, M-1$.
5. Εύρεση της θέσης μέγιστης διαφοράς(Eigengap): $k = argmax\delta_i$

Θέση μέγιστης διαφοράς των ιδιοτιμών του L (Eigengap)

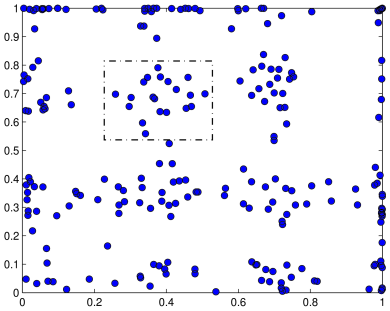
Παράδειγμα του κριτηρίου μέγιστης διαφοράς

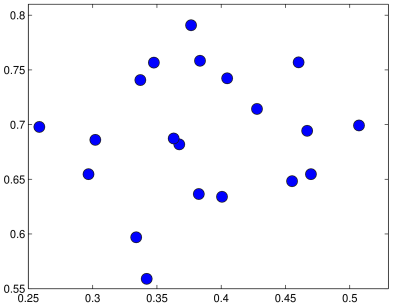




Υπολογισμός παραμέτρου σ

Η παράμετρος σ χρησιμοποιείται στην δημιουργία του πίνακα $A_{ij} = exp(-||x_i - x_j||^2/2\sigma^2)$.





Υπολογισμός σ

Η ποσότητα σ_i για το σημείο x_i ορίζεται από τη μέση απόσταση του κάθε σημείου από τους I_{nei} κοντινότερους γείτονες. $A_{ij} = exp(-||x_i - x_j||^2/2\sigma_i\sigma_j)$

Πληροφορία συσχέτισης προερχόμενη από την παράγωγο

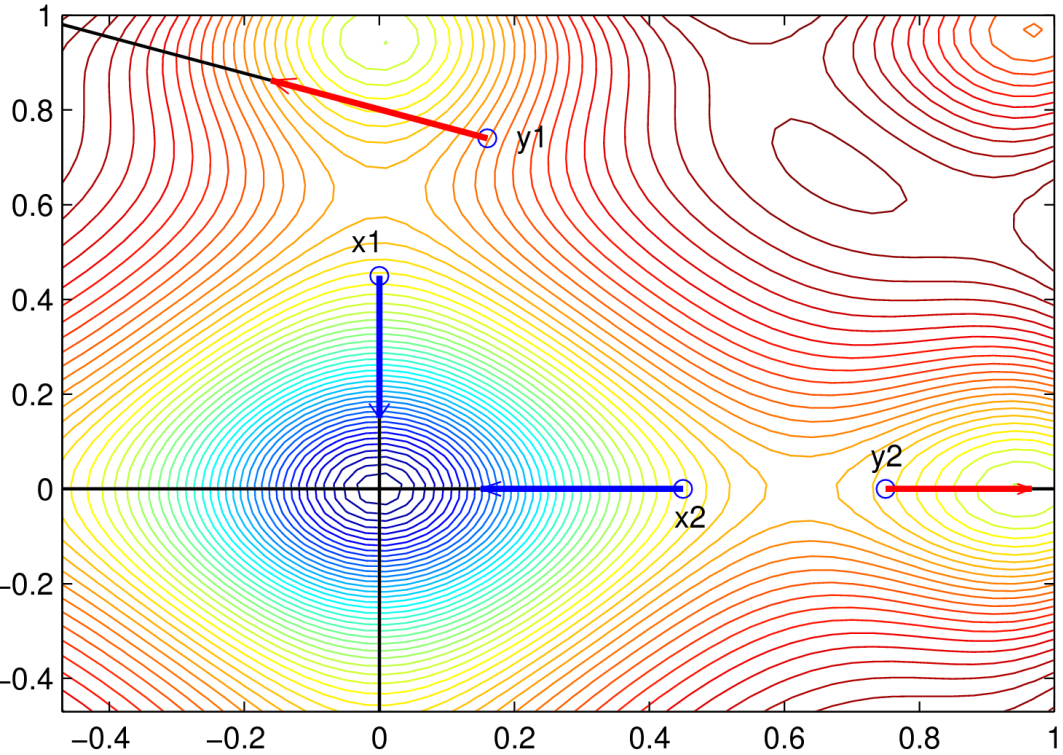


Figure: Παράδειγμα συσχέτισης και αποσυσχέτισης χρησιμοποιώντας την παράγωγο

$$
\begin{aligned}
x_i' &= x_i - \eta g_i \\
x_j' &= x_j - \eta g_j
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& x_i' - x_j' = x_i - x_j - \eta(g_i - g_j) \\
\Rightarrow \quad & ||x_i' - x_j'||^2 = ||x_i - x_j - \eta(g_i - g_j)||^2 \\
\Rightarrow \quad & ||\Delta x'||^2 = ||\Delta x||^2 + \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g \\
\Rightarrow \quad & ||\Delta x'||^2 - ||\Delta x||^2 = \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g < 0 \\
& -\eta(\Delta x)^T \Delta g < 0 \Rightarrow (\Delta x)^T \Delta g > 0
\end{aligned}
$$

- Αν $(\Delta x)^T \Delta g > 0$, συσχετιζόμενα
- Αν $(\Delta x)^T \Delta g < 0$, μη-συσχετιζόμενα

Πληροφορία συσχέτισης προερχόμενη από την παράγωγο

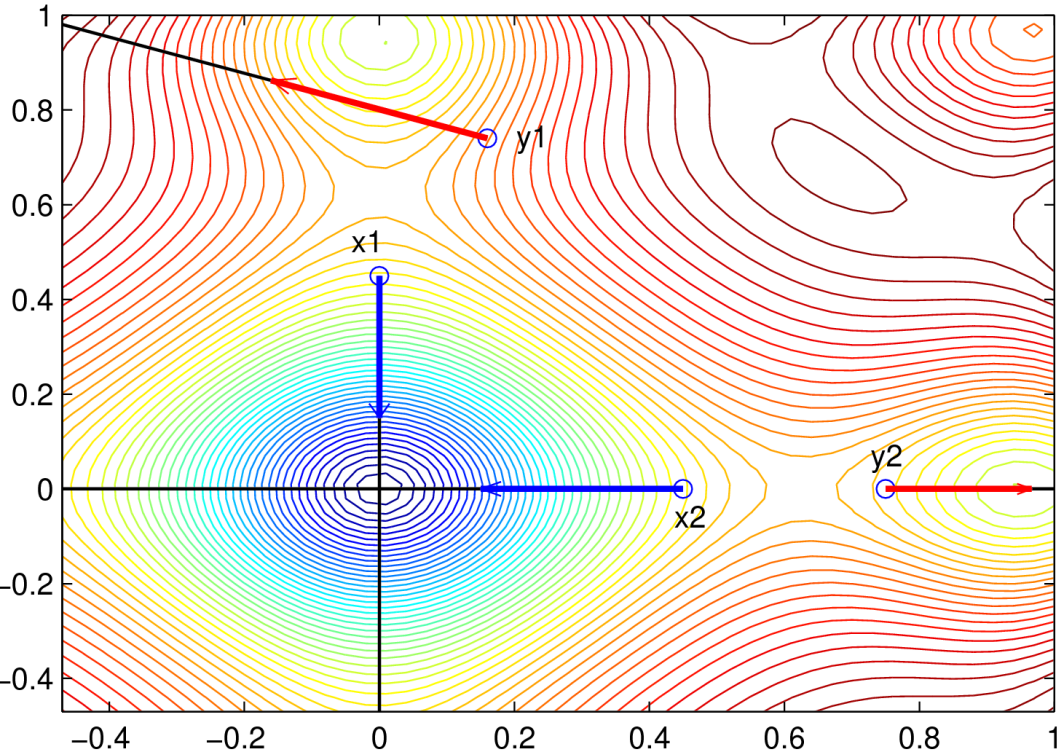


Figure: Παράδειγμα συσχέτισης και αποσυσχέτισης χρησιμοποιώντας την παράγωγο

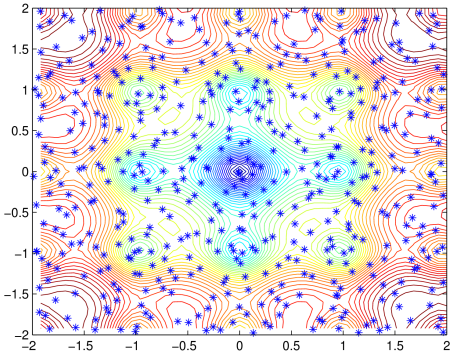
$$
\begin{aligned}
x_i' &= x_i - \eta g_i \\
x_j' &= x_j - \eta g_j
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& x_i' - x_j' = x_i - x_j - \eta(g_i - g_j) \\
\Rightarrow \quad & ||x_i' - x_j'||^2 = ||x_i - x_j - \eta(g_i - g_j)||^2 \\
\Rightarrow \quad & ||\Delta x'||^2 = ||\Delta x||^2 + \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g \\
\Rightarrow \quad & ||\Delta x'||^2 - ||\Delta x||^2 = \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g
\end{aligned}
$$

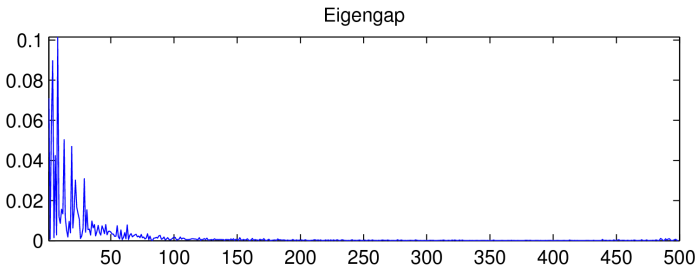
$$
\begin{aligned}
& \eta^2 ||\Delta g||^2 - 2\eta(\Delta x)^T \Delta g < 0 \\
& -\eta(\Delta x)^T \Delta g < 0 \Rightarrow (\Delta x)^T \Delta g > 0
\end{aligned}
$$

- Αν $(\Delta x)^T \Delta g > 0$, συσχετιζόμενα
- Αν $(\Delta x)^T \Delta g < 0$, μη-συσχετιζόμενα

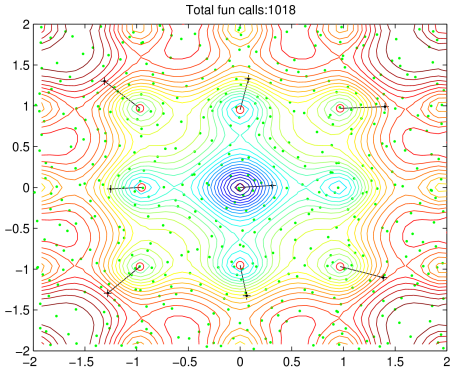
Πληροφορία συσχέτισης προερχόμενη από την παράγωγο: Επίδραση στην ομαδοποίηση



(a) Σημεία δειγματοληψίας

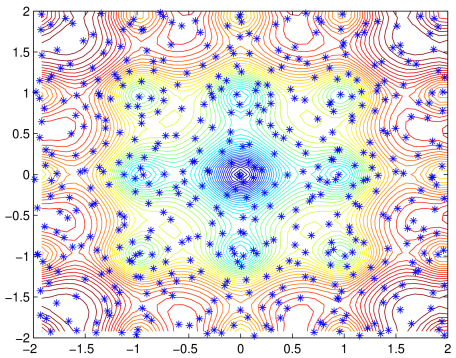


(b) Χωρίς παραγώγους - eigengap=8

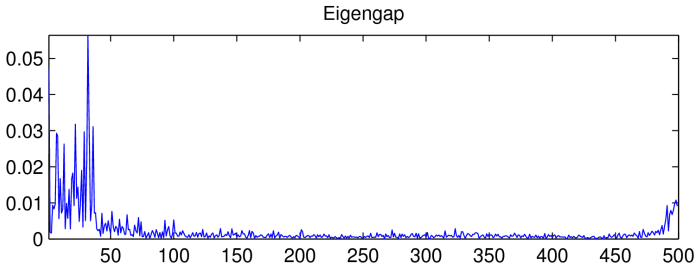


(c) Χωρίς παραγώγους - ομάδες

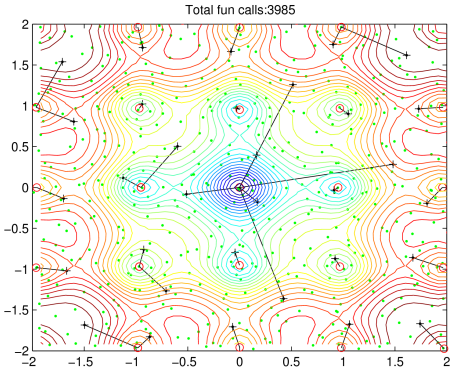
Πληροφορία συσχέτισης προερχόμενη από την παράγωγο: Επίδραση στην ομαδοποίηση



(a) Σημεία δειγματοληψίας



(b) Με παραγώγους - eigengap=31



(c) Με παραγώγους - ομάδες

Καθολικός αλγόριθμος k-μέσων

Καθολικός αλγόριθμος k-μέσων:

- Χωρίζει το σύνολο δεδομένων αυξητικά σε $j = 1, 2, \ldots, k$ ομάδες
- Χρησιμοποιεί πληροφορία από το j-οστό βήμα για να κατασκευάσει το $j + 1$
- Σε κάθε βήμα εκτελεί M φορές τον αλγόριθμο k-μέσων με διαφορετική αρχικοποίηση
- Ανεξάρτητος αρχικοποίησης

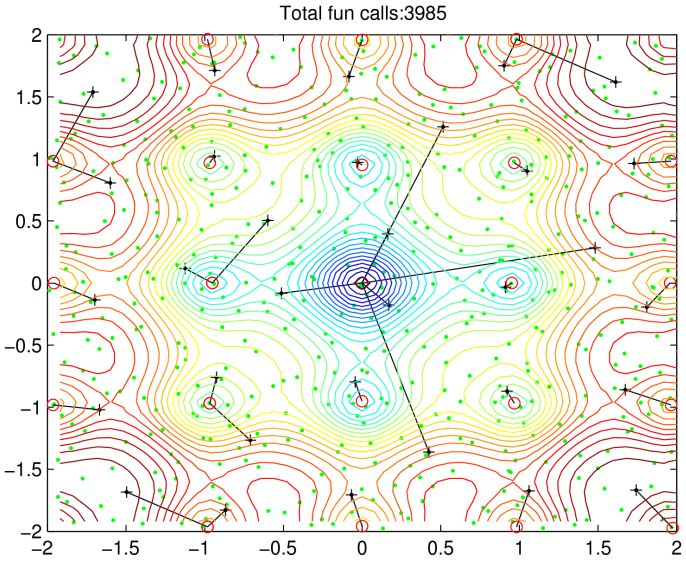
Καθολικός k-μέσων/ Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης

Καθολικός k-μέσων

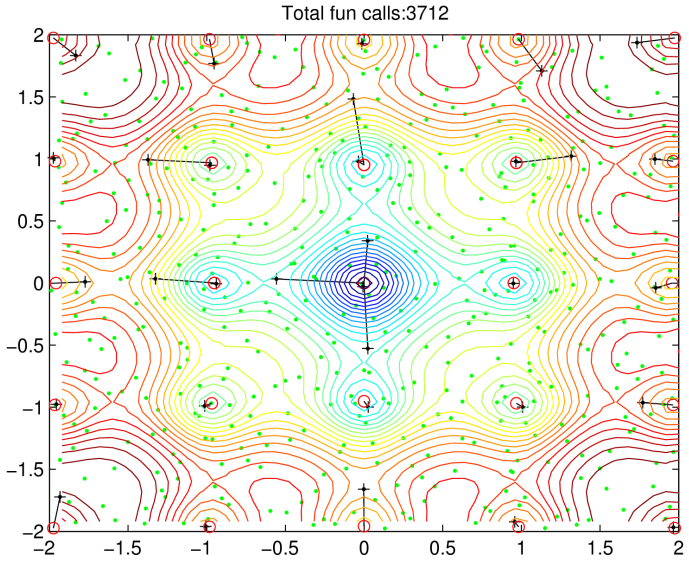
- **Χρησιμοποιεί Ευκλείδειες αποστάσεις**
- Δεν λαμβάνει υπόψη την παράγωγο
- Τα κέντρα είναι νέα σημεία

Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης:

- **Λειτουργεί στον πίνακα συσχέτισης**
- Χρησιμοποιεί την πληροφορία της παραγώγου
- Τα κέντρα ανήκουν στα σημεία δειγματοληψίας



(a)



(b)

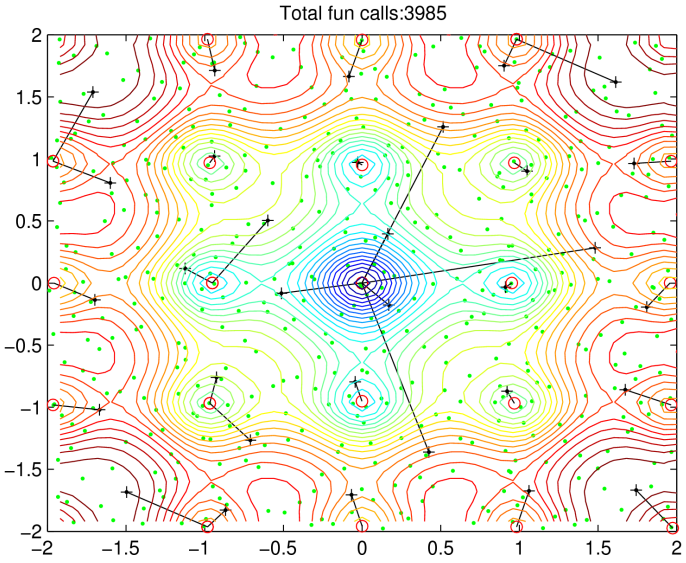
Καθολικός k-μέσων/ Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης

Καθολικός k-μέσων

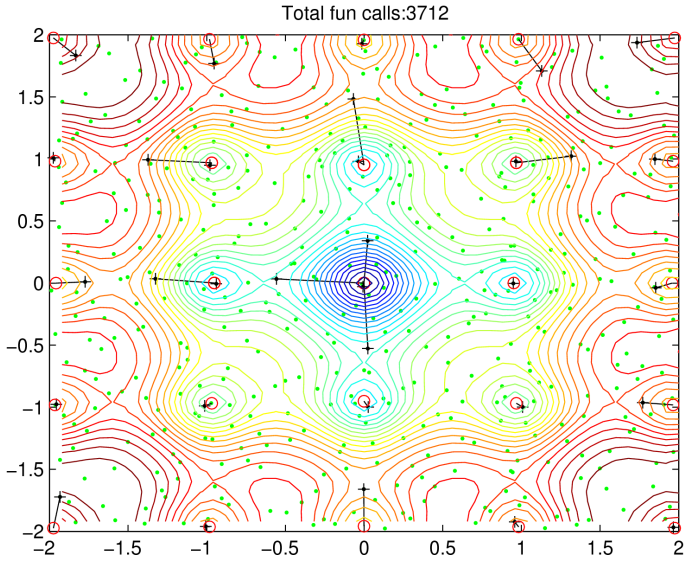
- Χρησιμοποιεί Ευκλείδειες αποστάσεις
- **Δεν λαμβάνει υπόψη την παράγωγο**
- Τα κέντρα είναι νέα σημεία

Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης:

- Λειτουργεί στον πίνακα συσχέτισης
- **Χρησιμοποιεί την πληροφορία της παραγώγου**
- Τα κέντρα ανήκουν στα σημεία δειγματοληψίας



(a)



(b)

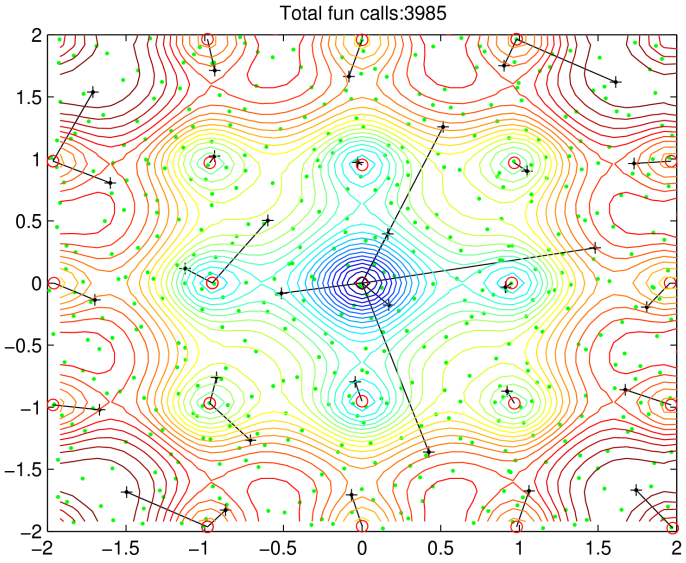
Καθολικός k-μέσων/ Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης

Καθολικός k-μέσων

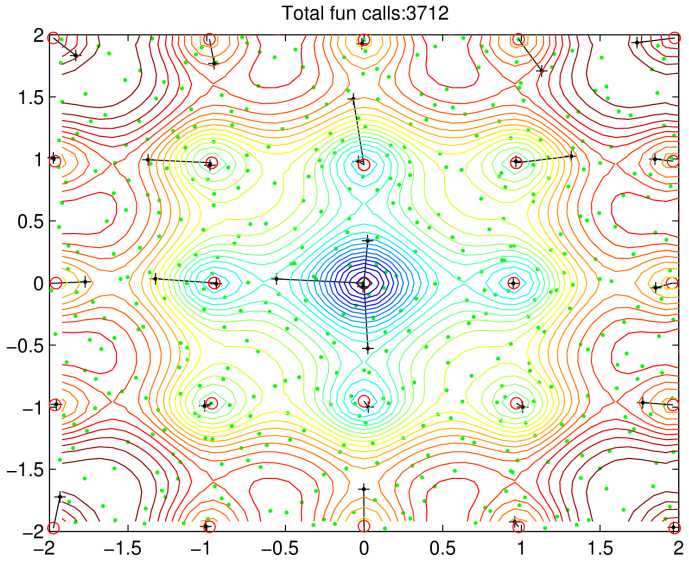
- Χρησιμοποιεί Ευκλείδειες αποστάσεις
- Δεν λαμβάνει υπόψη την παράγωγο
- **Τα κέντρα είναι νέα σημεία**

Καθολικός k-διάμεσων στον πίνακα συσχέτισης:

- Λειτουργεί στον πίνακα συσχέτισης
- Χρησιμοποιεί την πληροφορία της παραγώγου
- **Τα κέντρα ανήκουν στα σημεία δειγματοληψίας**

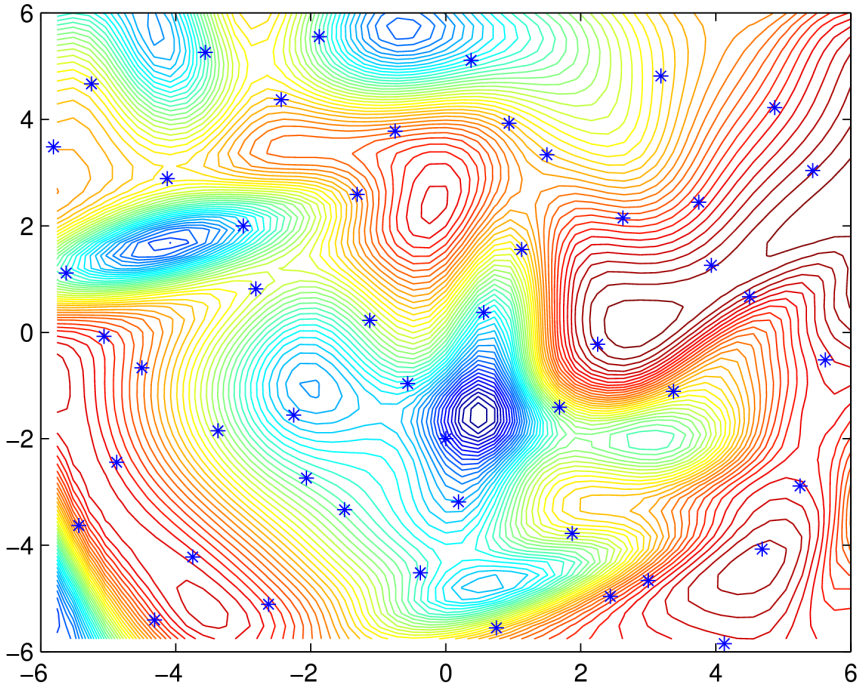


(a)



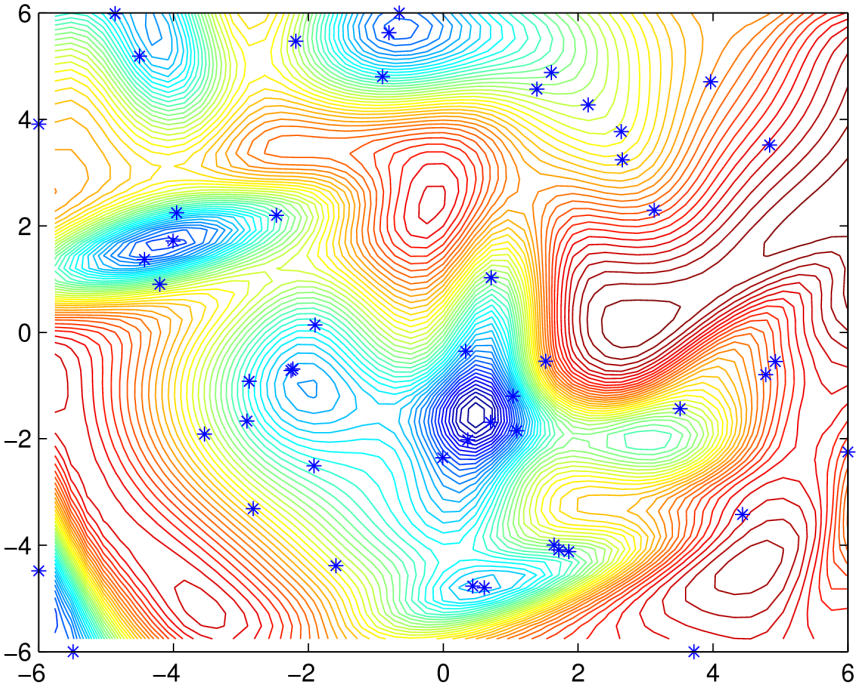
(b)

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



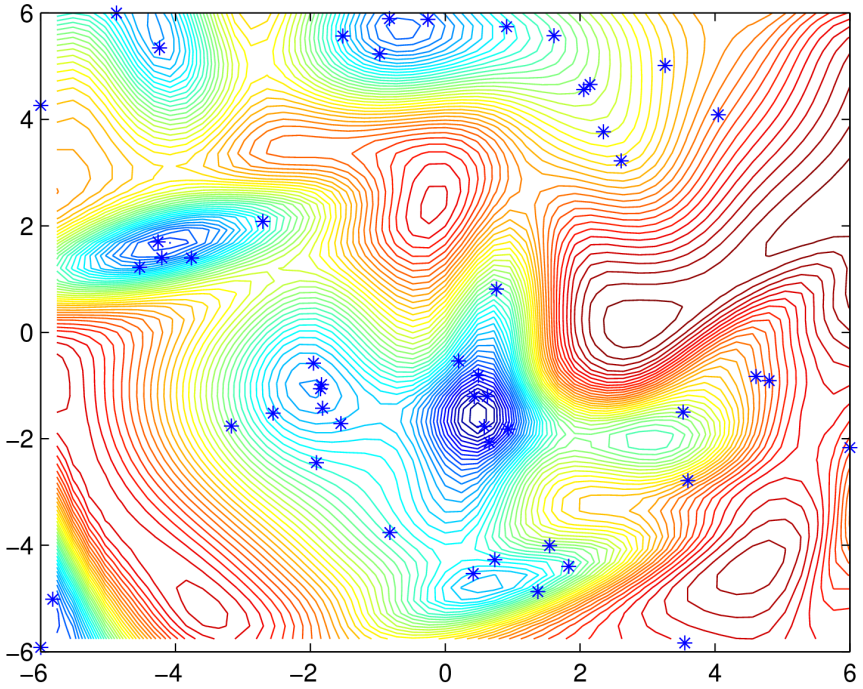
(a) 1η επανάληψη

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



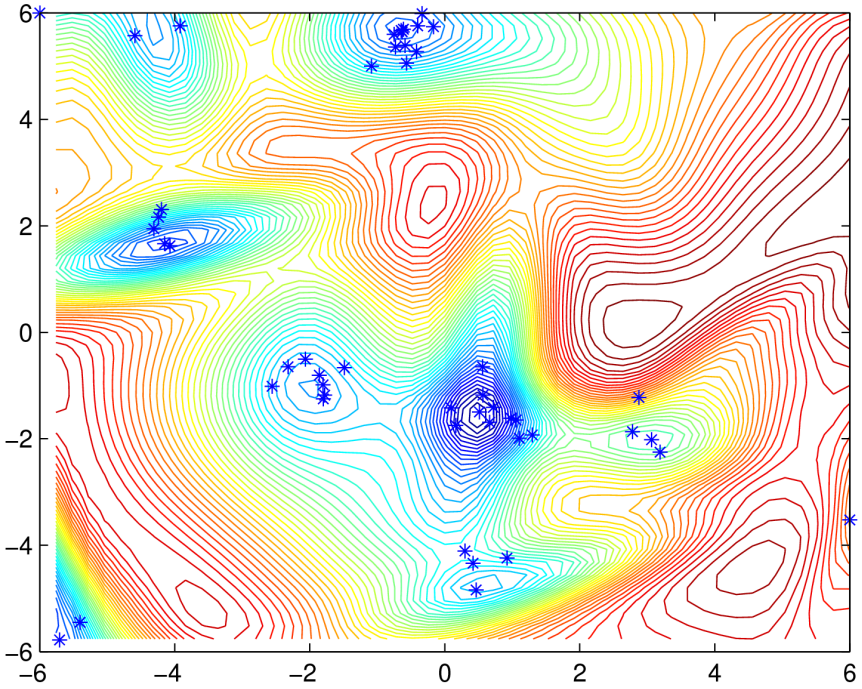
(a) 2η επανάληψη

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



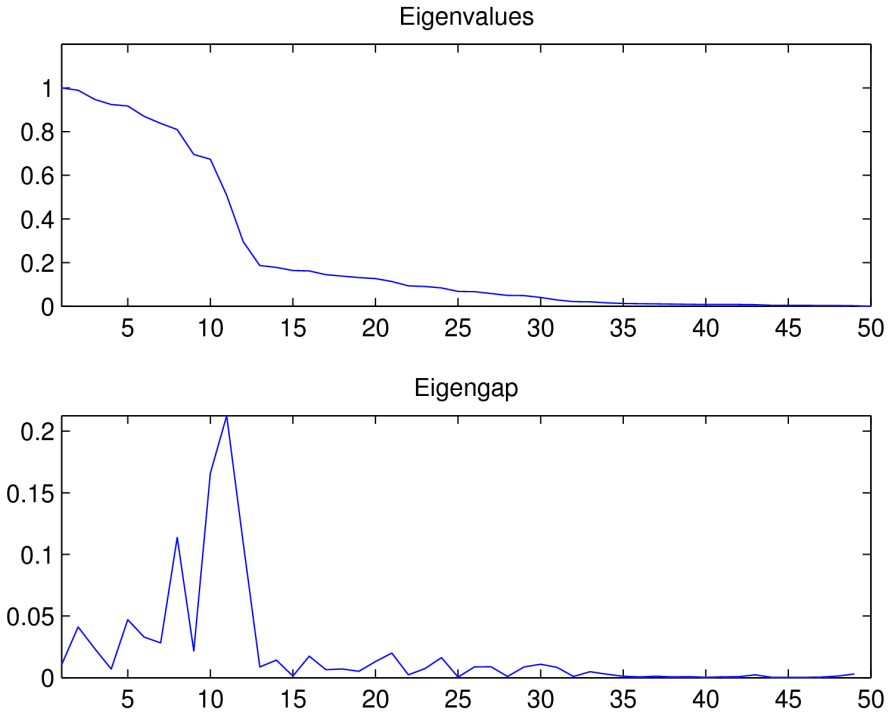
(a) 3η επανάληψη

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



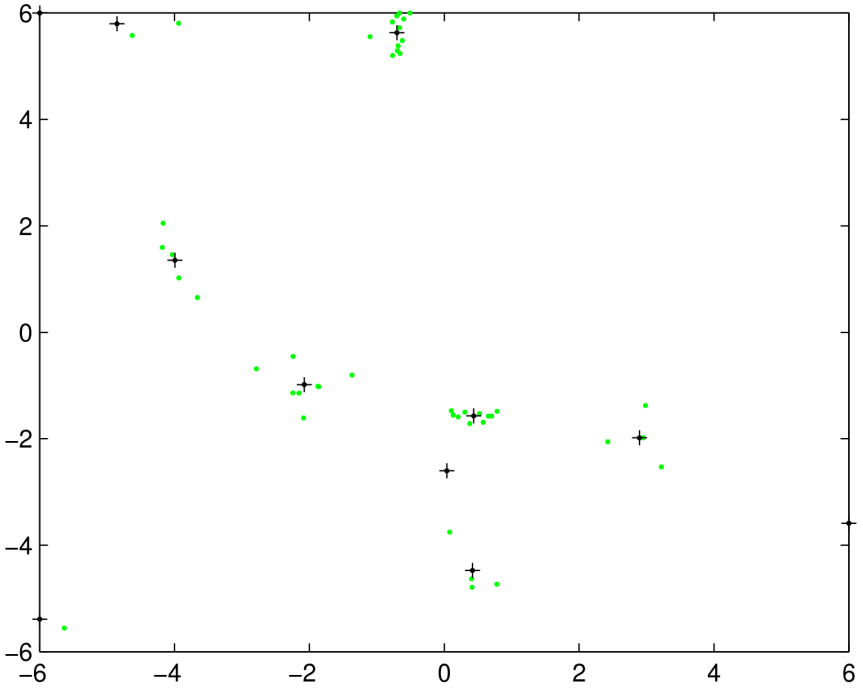
(a) 4η επανάληψη

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



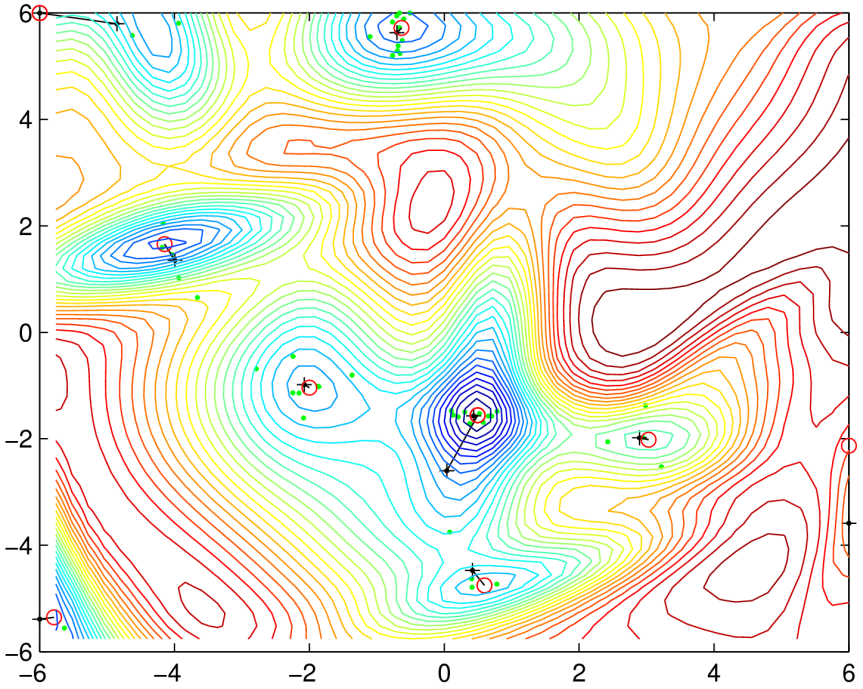
(a) Ιδιοτιμές

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



(a) Ομαδοποίηση

Παράδειγμα εκτέλεσης ομαδοποίησης



(a) Ελάχιστα

Συγκριτικά αποτελέσματα

	k-μέσοι			k-διάμεσοι		
	Nom	NLocal	Nfunction	Nom	NLocal	Nfunction
Rastrigin(49)	49	56	3434	48	49	3262
Holder(25)	25	49	3386	25	49	3352
Beale(3)	3	13	3208	3	13	3207
Bird(6)	6	16	3143	6	16	3124
Boha(25)	25	33	3213	25	33	3187
Branin(3)	3	13	3102	3	9	3057
Carrom(169)	169	169	3816	169	169	3794
Chichi(16)	16	43	3480	14	43	3293
Giunta(16)	16	23	3165	16	23	3126
Gpr(4)	4	7	3077	4	17	3136
Griew(60)	60	87	3517	60	87	3481
Guill(25)	20	161	4355	18	161	4305
Hansen(56)	54	57	3448	56	57	3344
Lager(76)	76	449	6486	76	449	6322
Schaf(422)	422	512	7209	421	510	7121
Shekel(10)	10	10	3133	10	10	3136
Shubert(100)	98	102	3488	94	102	3472
Tube(28)	28	146	4034	28	146	3938
m0(18)	18	85	3605	17	85	3542
m3(13)	13	232	4963	13	232	4758
m5(36)	36	44	4067	34	44	3937
gauss(3)	3	179	4679	3	179	4615
frand(25)	25	258	5482	26	258	5457
	1179	2744	91490	1169	2741	89966

Νέα μονοτόνως φθίνουσα μέθοδος τοπικής ελαχιστοποίησης

Πρώτες αναφορές

Οι Kan and Timmer για θεωρητική ανάλυση των μεθόδων ομαδοποίησης όρισαν μια ειδική περίπτωση γραμμικής αναζήτησης:

Γραμμική αναζήτηση: Γενική περίπτωση

$x_{k+1} = x_k + a_k p_k$, p_k διεύθυνση πτώσης a_k θετικό βήμα

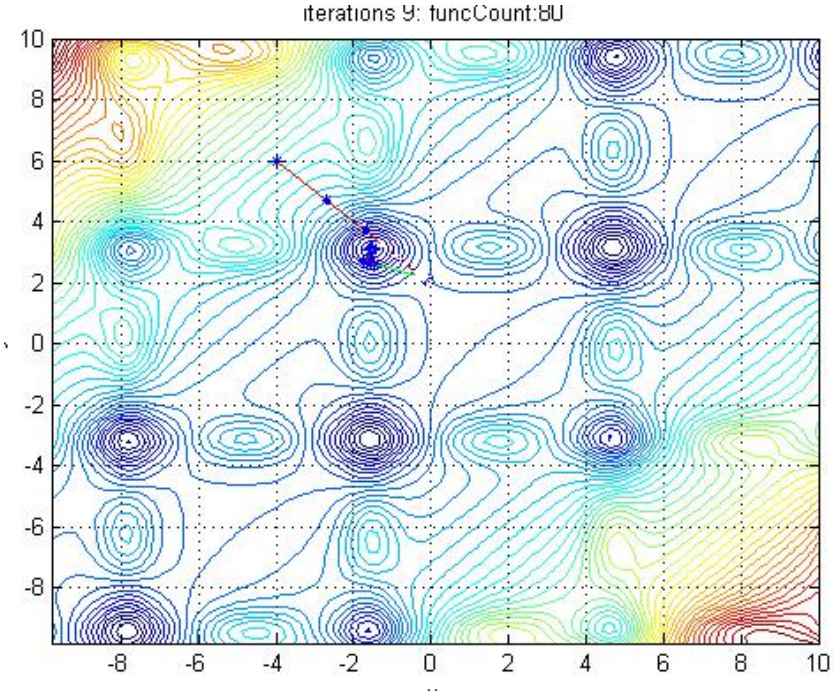
Ορισμός απόλυτα φθίνουσας και ϵ φθίνουσας:

- $f(x_k + \beta p_k) \leq f(x_k + \alpha p_k)$ όπου $\alpha < \beta \leq a_k$
- $f(x_k + i\varepsilon p_k) \leq f(x_k + (i-1)\varepsilon p_k) \quad \left(i = 1, 2, \ldots, \left[\frac{a_k}{\varepsilon}\right]\right)$

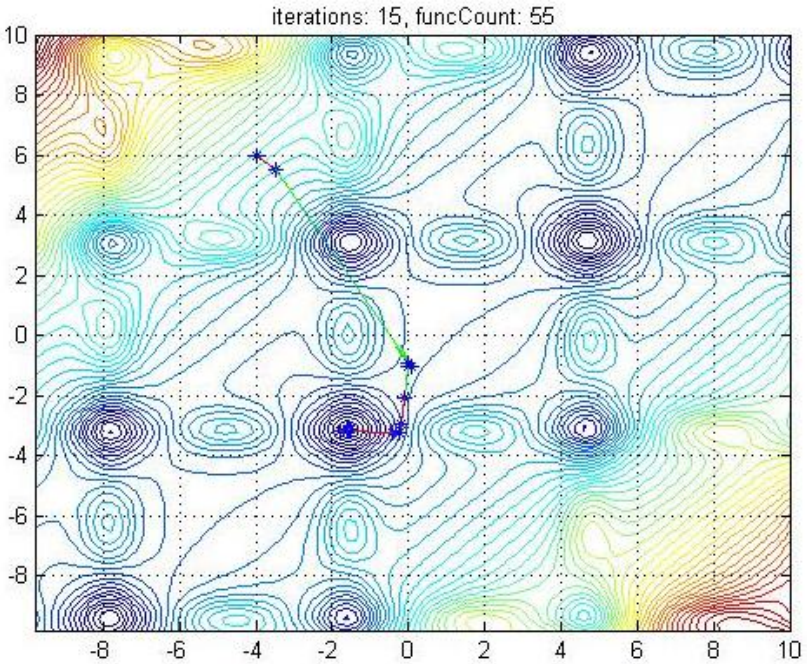
Συνεισφορά της διατριβής

Σχεδίαση αλγορίθμου για μονοτόνως φθίνουσα τοπική ελαχιστοποίηση

Παράδειγμα μονοτόνως φθίνουσας μεθόδου

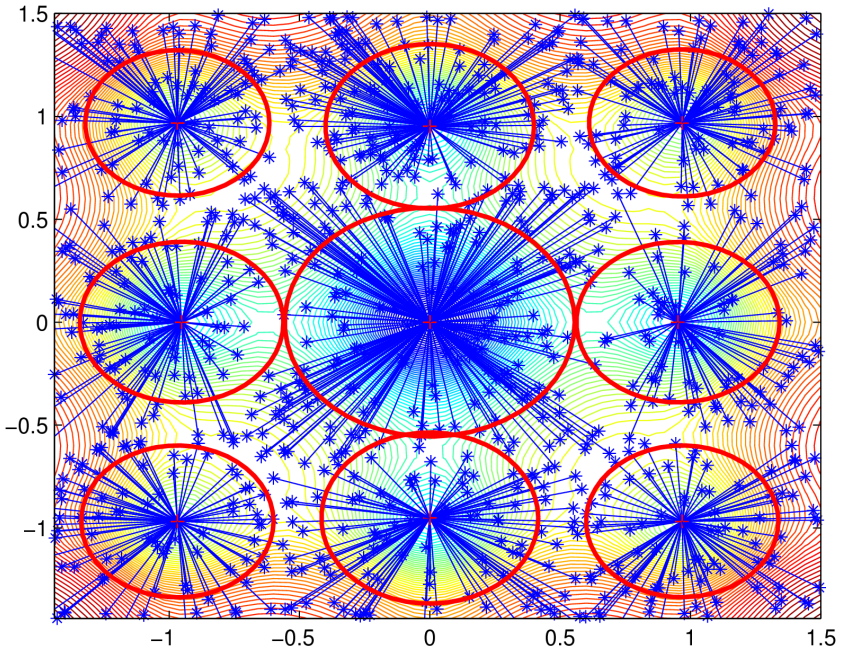


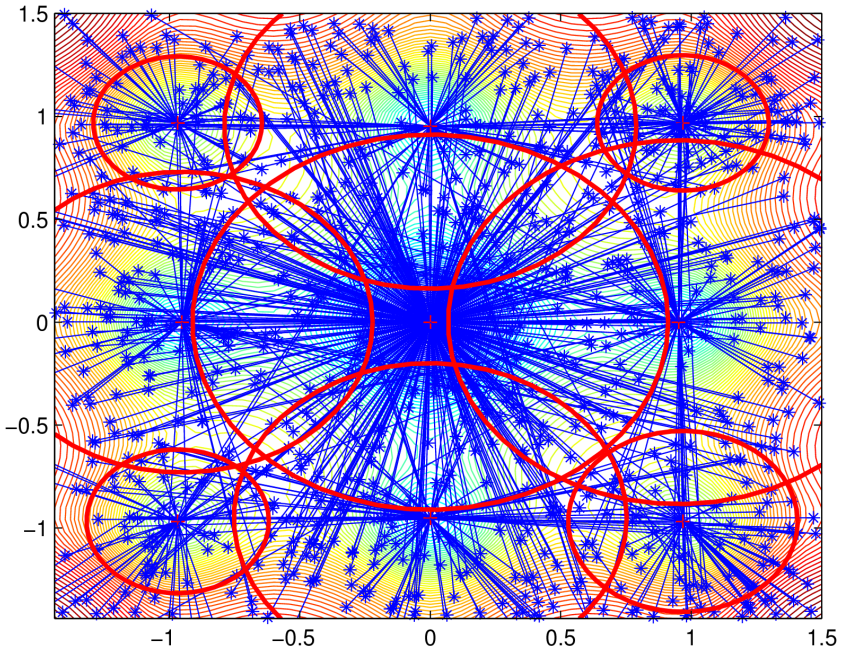
(a) Μονοτόνως φθίνουσα ελαχιστοποίση



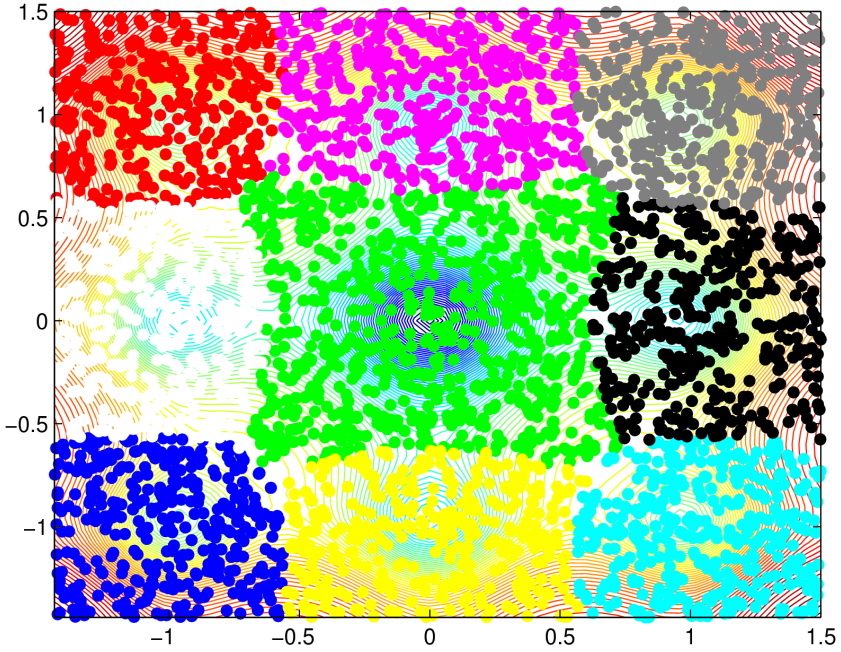
(b) Κλασσική τοπική ελαχιστοποίηση

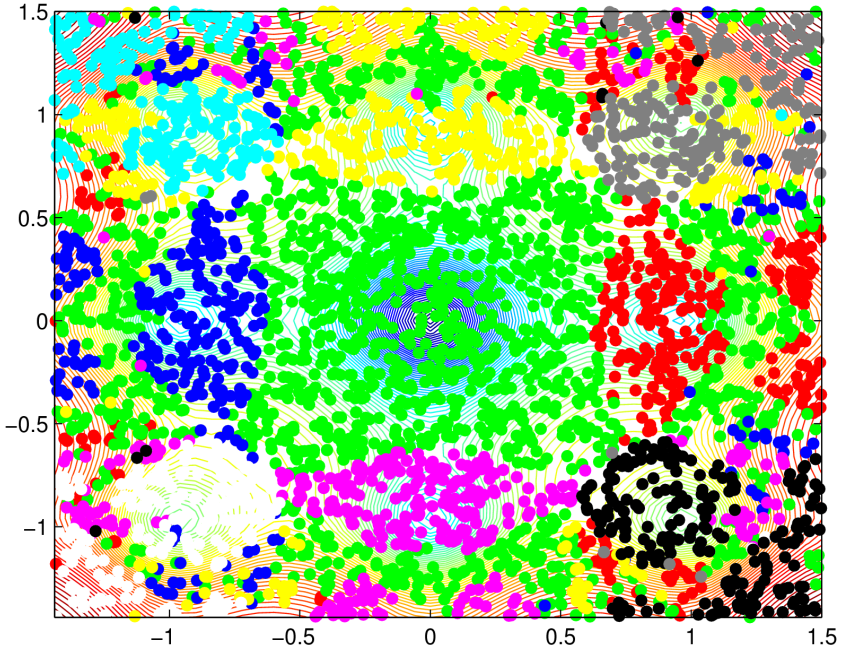
Αναγκαιότητα μιας μονοτόνως φθίνουσας τοπικής ελαχιστοποίησης





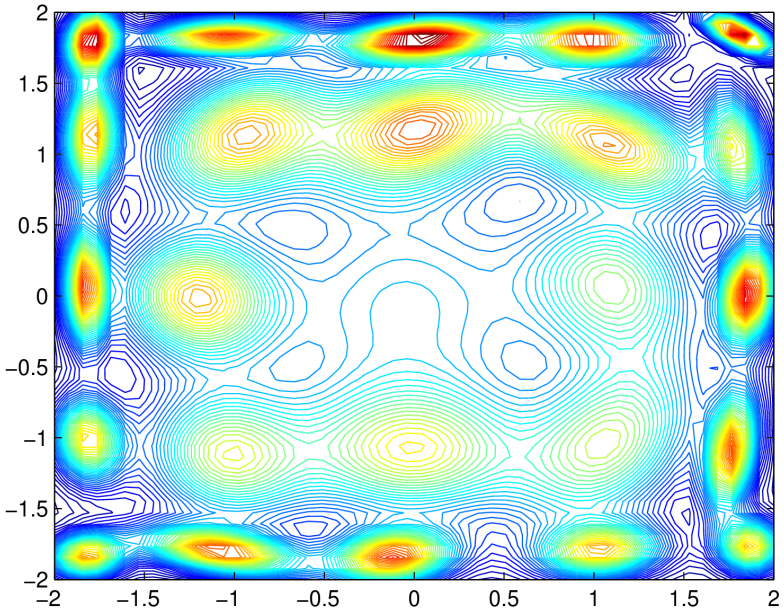
Αναγκαιότητα μιας μονοτόνως φθίνουσας τοπικής ελαχιστοποίησης

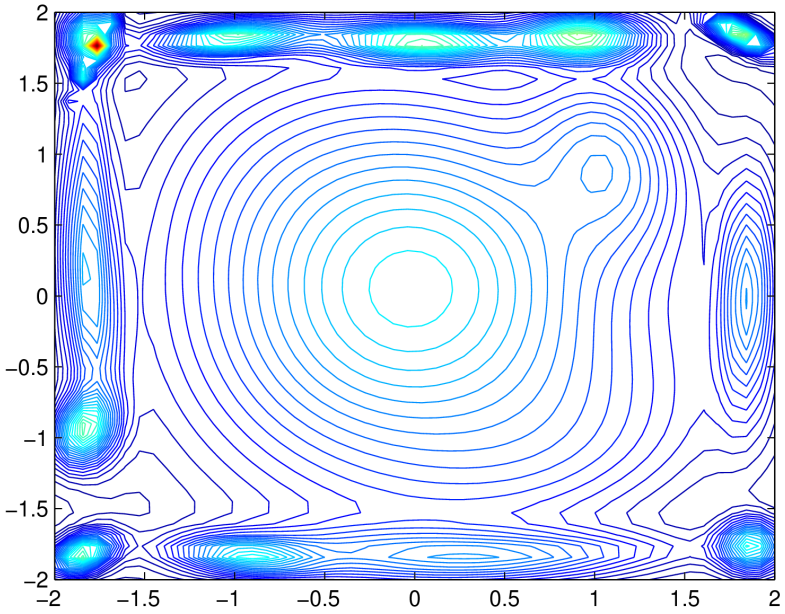




Αναγκαιότητα μιας μονοτόνως φθίνουσας τοπικής ελαχιστοποίησης (συνέχεια)

Επιστροφή στο άθροισμα κανονικών κατανομών:



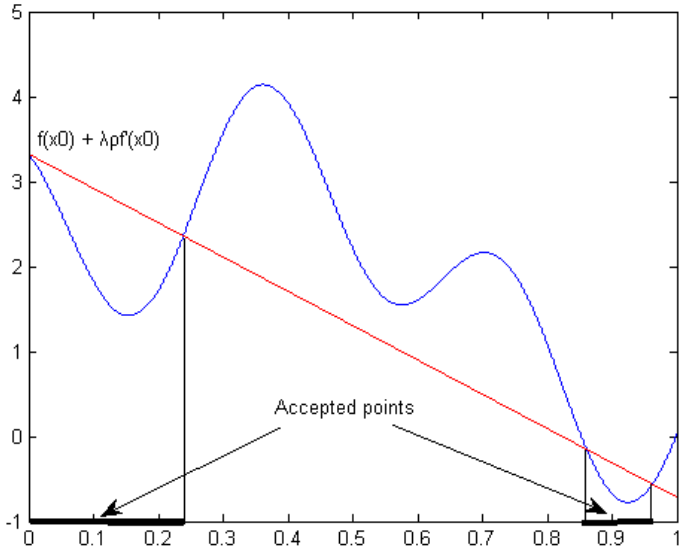


Βασικές ιδιότητες

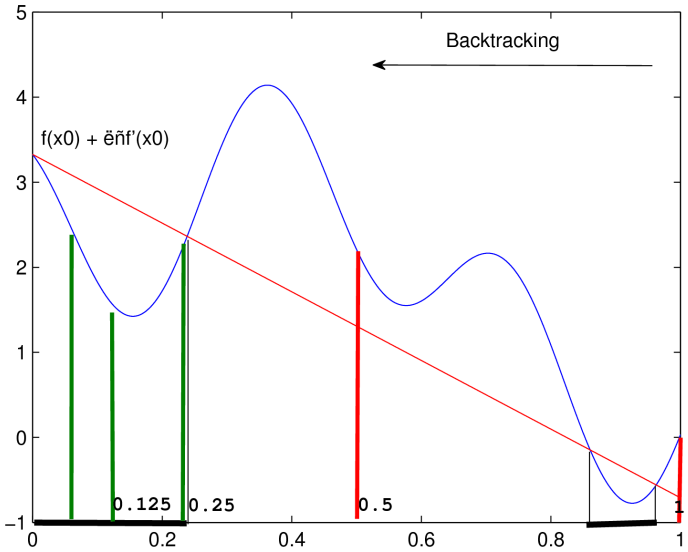
- Μέθοδος γραμμικής αναζήτησης σε φθίνουσα κατεύθυνση p_k
- Τροποποίηση της κλασικής μεθόδου οπισθοχώρησης με συνθήκη Armijo

$$f(x_0 + \lambda_k p_k) < f(x_0) + \lambda_k \rho f'(x_0)$$

- **Αντί για οπισθοχώρηση, αναζήτηση απομακρυνόμενη από το αρχικό σημείο**



(a) Συνθήκη Armijo



(b) Οπισθοχώρηση $\lambda = 0.5$

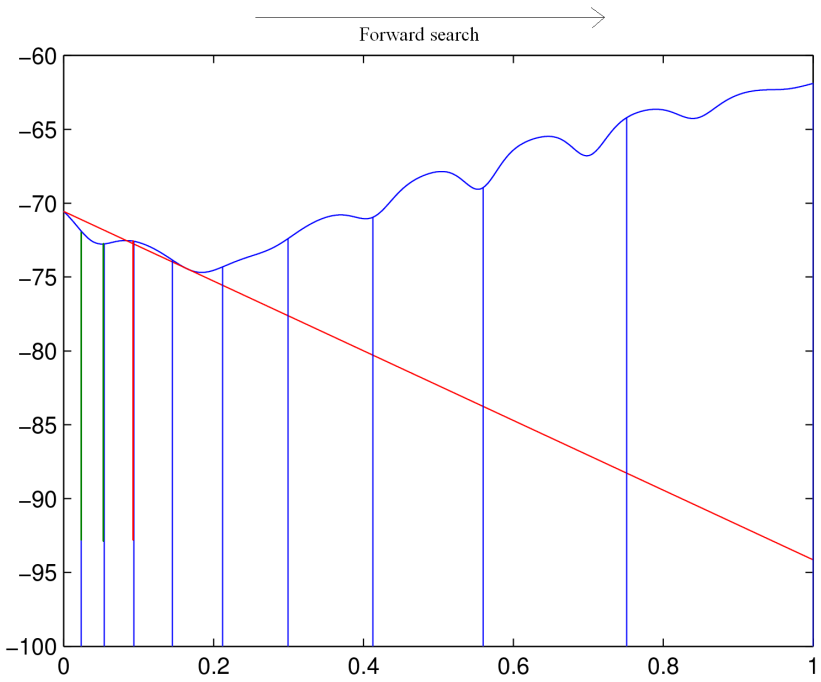
Νέα μέθοδος γραμμικής αναζήτησης

Δημιουργία κατάλληλης διαμέρισης ν σημείων με γεωμετρικώς αυξανόμενο βήμα λόγου μ:

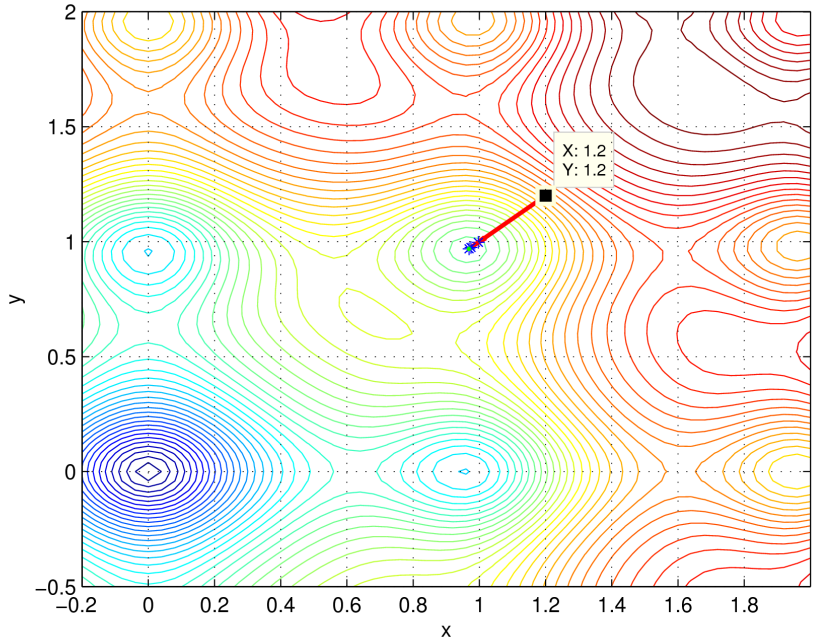
$$\lambda_i = \frac{\mu^i - 1}{\mu^\nu - 1} \min(1, \frac{\max(1, ||x_k||)}{||s_k||})$$

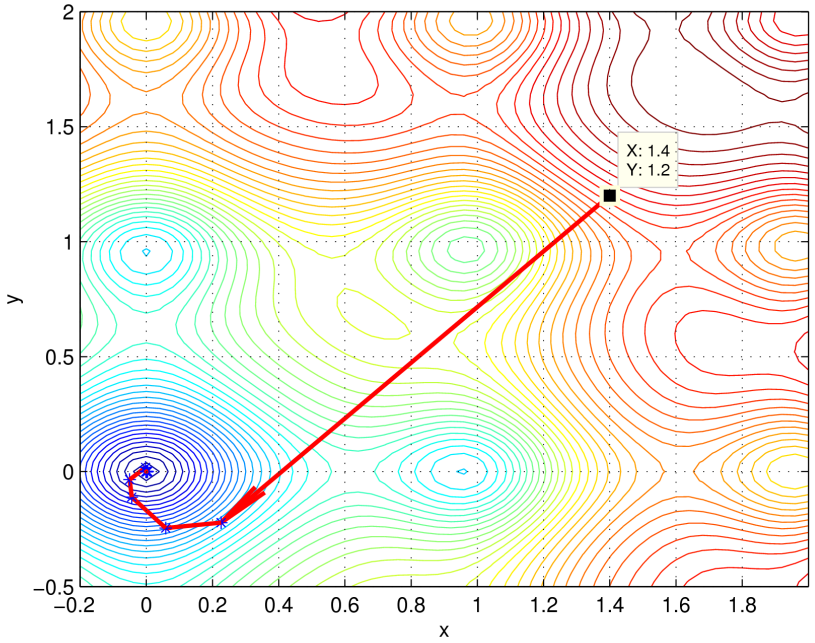
Αποδοχή του σημείου λ_i τέτοιου ώστε:

$$f(x_k + \lambda_i p_k) < f(x_k) + \rho \lambda_i p_k^T \nabla f(x_k) \text{ and } f(x_k + \lambda_i p_k) < f(x_k + \lambda_{i+1} p_k)$$

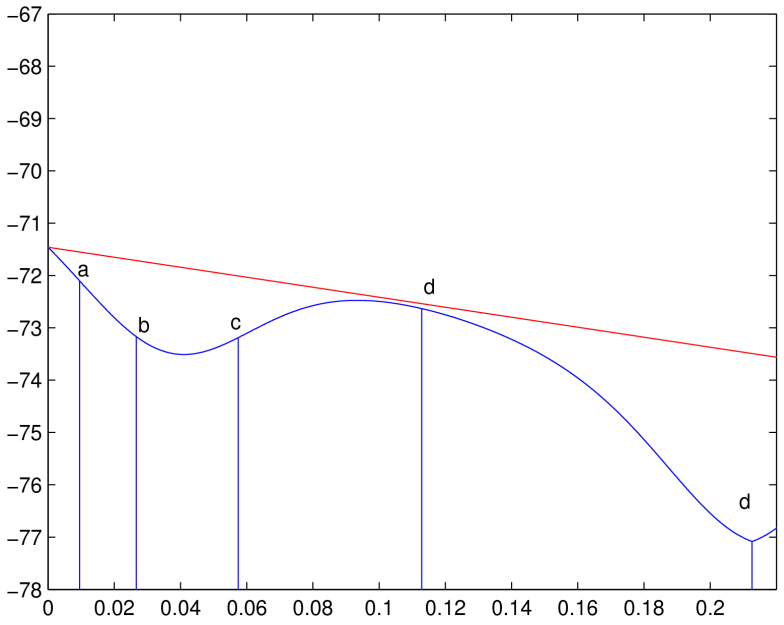


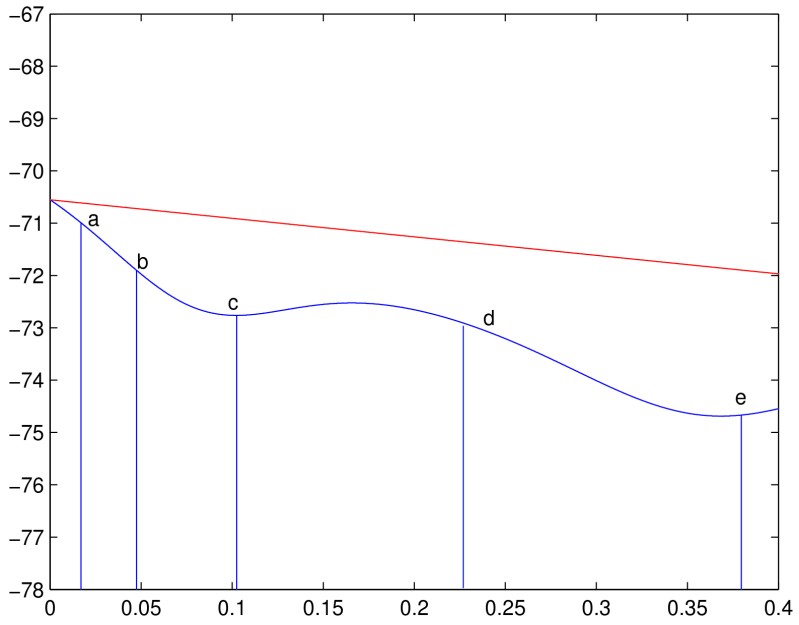
Προβλήματα





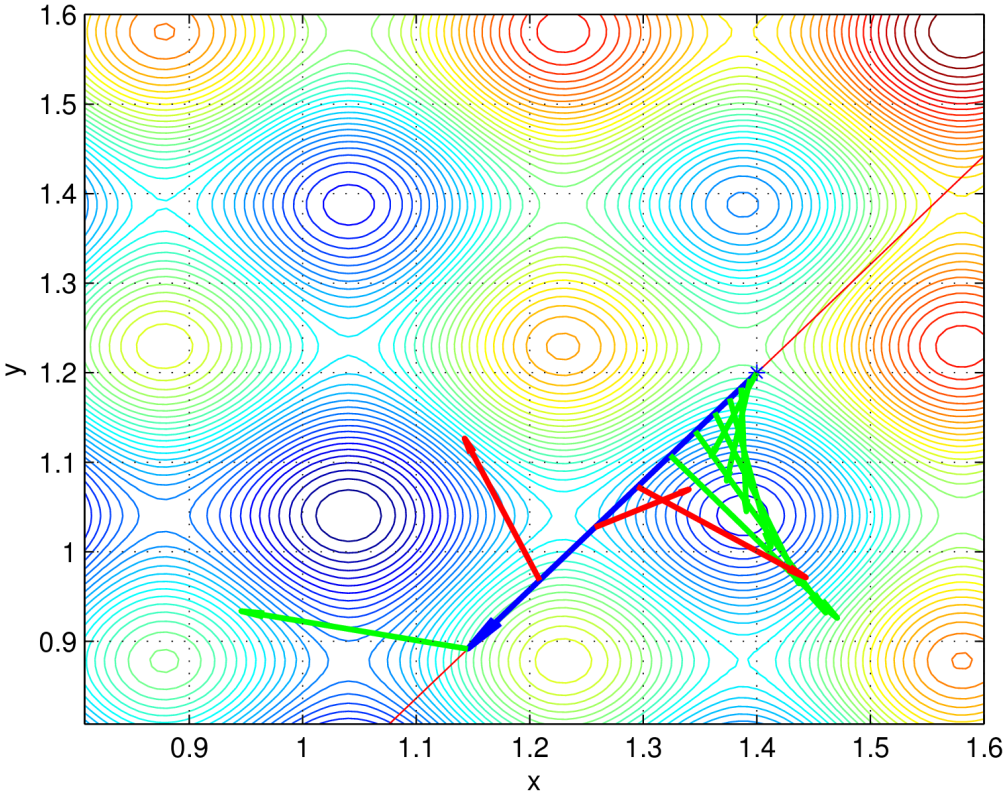
Προβλήματα


−67
−68
−69
−70
−71
−72
−73
−74
−75
−76
−77
−78
0
0.02
0.04
0.06
0.08
0.1
0.12
0.14
0.16
0.18
0.2
a
b
c
d
d


−67
−68
−69
−70
−71
−72
−73
−74
−75
−76
−77
−78
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
a
b
c
d
e

Προσθήκη πληροφορίας παραγώγου

Ιδέα: Το εσωτερικό γινόμενο της διεύθυνσης πτώσης p_k και της $\nabla f(x_0 + \lambda_i p_k)$ αλλάζει πρόσημο



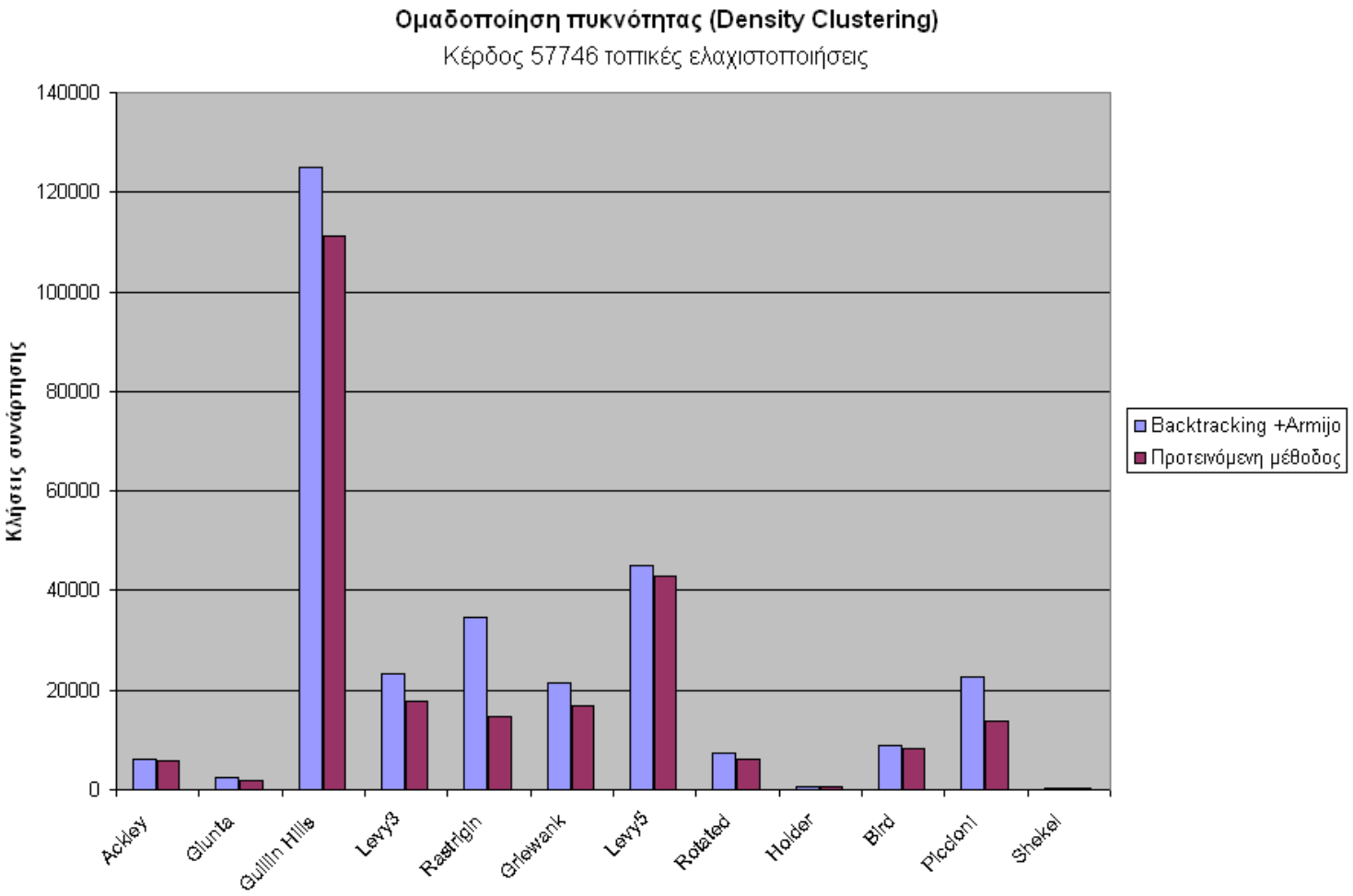
Διόρθωση του προηγούμενου προβλήματος

Αποτελεσματικότητα σε σχέση με την επιθυμητή λύση

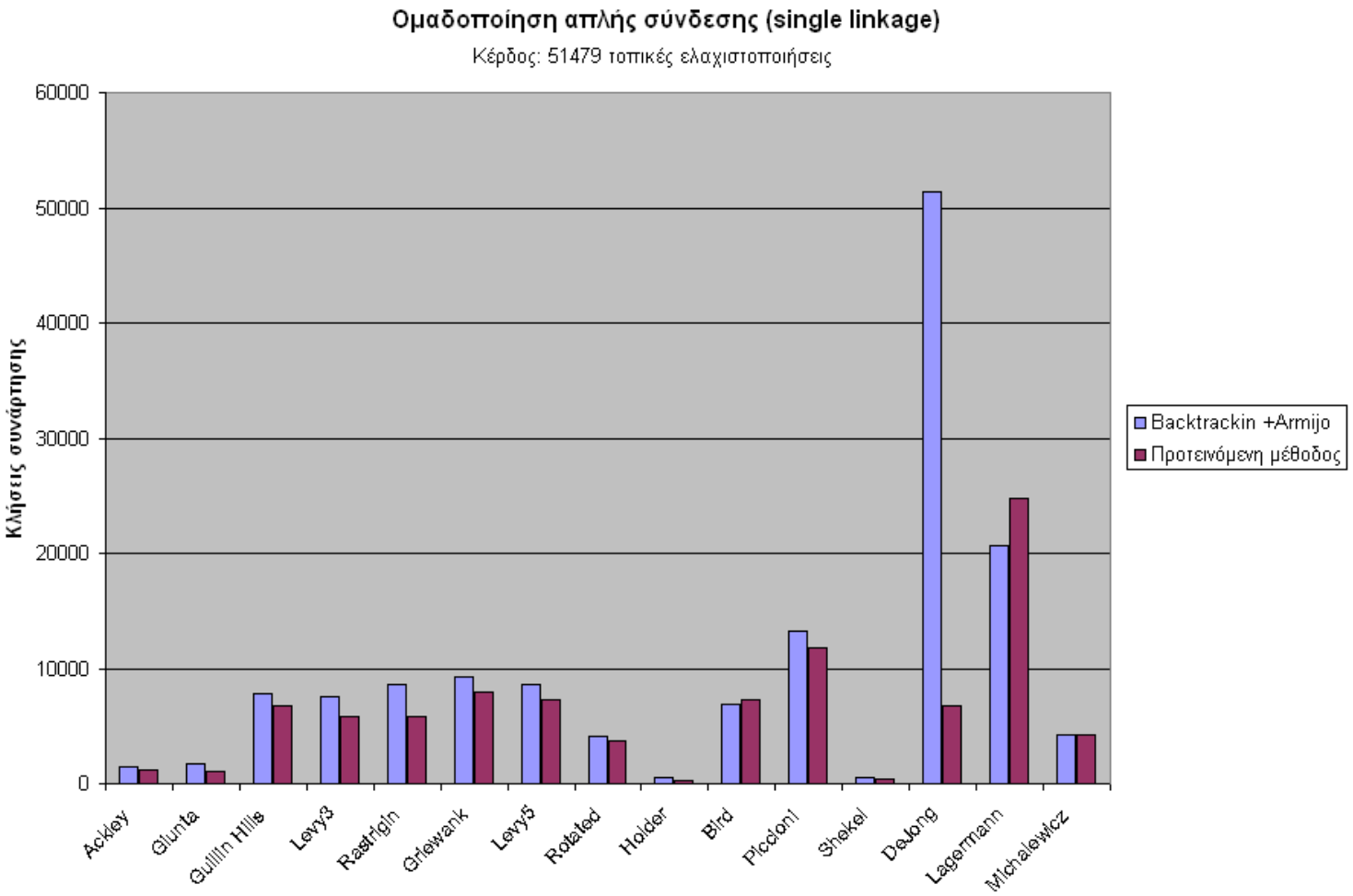
Κλασική τοπική ελαχιστοποίηση				
Function	Correct	Error	Iters.	% Success
Ackley	555	445	15704	55,50%
Giunta	588	442	12013	57,09%
Guillin	477	523	17764	47,70%
Levy3	1285	715	20783	64,25%
Rastrigin	599	401	9240	59,90%
Griewank	695	305	10244	69,50%
Bird	704	296	14104	70,40%
Levy5	1272	728	21476	63,60%
Rot. Quad	539	461	12001	53,90%
Holder	597	403	12235	59,70%
Liang	561	439	11671	56,10%
Piccioni	726	274	24874	72,60%
Shekel	145	155	3757	48,33%
M0	717	1283	132739	35,85%
Lager	581	419	11342	58,10%
Tube	727	273	10034	72,70%
Mich	178	322	11472	35,60%
Dejong	301	199	18417	60,20%
Sum / Ave.	11247	8083	**369870**	**57.8**%

Προτεινόμενη n=10, m=1.3				
Function	Correct	Error	Iters.	%
Ackley	874	126	11555	87,40%
Giunta	912	95	12891	90,57%
Guillin	896	109	10211	89,15%
Levy3	1910	90	19882	95,50%
Rastrigin	1000	0	9031	100,00%
Griewank	998	2	9403	99,80%
Bird	913	87	10782	91,30%
Levy5	1811	189	19282	90,55%
Rot. Quad	903	97	9964	90,30%
Holder	995	5	10554	99,50%
Liang	702	298	11782	70,20%
Piccioni	997	3	9021	99,70%
Shekel	250	50	3783	83,33%
M0	1200	800	19826	60,00%
Lager	901	99	10435	90,10%
Tube	1000	0	8991	100,00%
Mich	356	144	11282	71,20%
Dejong	489	12	16822	97,60%
Sum / Ave	17107	2206	**215497**	**89,23**%

Εφαρμογή σε μεθόδους καθολικής βελτιστοποίησης



Εφαρμογή σε μεθόδους καθολικής βελτιστοποίησης



Νέο κριτήριο τερματισμού

Ιδέα για το κριτήριο τερματισμού

Ορισμός προβλήματος

Έστω κουτί με w διαφορετικές σφαίρες. Οι σφαίρες είναι αριθμημένες $1, 2, 3, \ldots, w$. Επιλέγουμε μια σφαίρα στην τύχη εξετάζουμε τον αριθμό της και την ξαναβάζουμε στο κουτί. Αυτή θεωρείται μια επανάληψη. Αν η σφαίρα επιλέχθηκε για πρώτη φορά αυξάνουμε τον αριθμό ξεχωριστών σφαιρών m κατά ένα.

Ιδέα για το κριτήριο τερματισμού

Ορισμός προβλήματος

Έστω κουτί με w διαφορετικές σφαίρες. Οι σφαίρες είναι αριθμημένες $1, 2, 3, \ldots, w$. Επιλέγουμε μια σφαίρα στην τύχη εξετάζουμε τον αριθμό της και την ξαναβάζουμε στο κουτί. Αυτή θεωρείται μια επανάληψη. Αν η σφαίρα επιλέχθηκε για πρώτη φορά αυξάνουμε τον αριθμό ξεχωριστών σφαιρών m κατά ένα.

Αντιστοίχιση με πρόβλημα βελτιστοποίησης

Τυχαία επιλογή σφαίρας και έλεγχος του αριθμού της $\longleftrightarrow$ Τυχαία επιλογή αρχικού σημείο και εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης

Ιδέα για το κριτήριο τερματισμού

Ορισμός προβλήματος

Έστω κουτί με w διαφορετικές σφαίρες. Οι σφαίρες είναι αριθμημένες $1, 2, 3, \ldots, w$. Επιλέγουμε μια σφαίρα στην τύχη εξετάζουμε τον αριθμό της και την ξαναβάζουμε στο κουτί. Αυτή θεωρείται μια επανάληψη. Αν η σφαίρα επιλέχθηκε για πρώτη φορά αυξάνουμε τον αριθμό ξεχωριστών σφαιρών m κατά ένα.

Αντιστοίχιση με πρόβλημα βελτιστοποίησης

Τυχαία επιλογή σφαίρας και έλεγχος του αριθμού της $\longleftrightarrow$ Τυχαία επιλογή αρχικού σημείο και εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης

Ιδέα για το κριτήριο τερματισμού

Ορισμός προβλήματος

Έστω κουτί με w διαφορετικές σφαίρες. Οι σφαίρες είναι αριθμημένες $1, 2, 3, \ldots, w$. Επιλέγουμε μια σφαίρα στην τύχη εξετάζουμε τον αριθμό της και την ξαναβάζουμε στο κουτί. Αυτή θεωρείται μια επανάληψη. Αν η σφαίρα επιλέχθηκε για πρώτη φορά αυξάνουμε τον αριθμό ξεχωριστών σφαιρών m κατά ένα.

Αντιστοίχιση με πρόβλημα βελτιστοποίησης

Τυχαία επιλογή σφαίρας και έλεγχος του αριθμού της $\longleftrightarrow$ **Τυχαία επιλογή αρχικού σημείο και εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης**

Βασικοί τύποι

Ορίζουμε $p_m^{(k)}$: Πιθανότητα να έχουν βρεθεί m διαφορετικές σφαίρες στην επανάληψη k

Αναμενόμενος αριθμός διαφορετικών σφαιρών μετά από k επαναλήψεις

$$< N >^{(k)} = \sum_{i=1}^{k} i \cdot p_i^{(k)} = p_1^{(k)} + 2p_2^{(k)} + \cdots + kp_k^{(k)}$$

Αναδρομικός ορισμός της $p_m^{(k)}$

$$p_i^{(k+1)} = \alpha_i p_i^{(k)} + \beta_i p_{i-1}^{(k)}$$

- Η πιθανότητα στην επανάληψη k να έχουν βρεθεί i διαφορετικά ελάχιστα και στην επανάληψη $k+1$ να μην βρεθεί κανένα (με πιθανότητα α_i)
- Η πιθανότητα στην επανάληψη k να έχουν βρεθεί $i-1$ διαφορετικά ελάχιστα και στην $k+1$ να βρεθεί ένα ακόμα νέο ελάχιστο (με πιθανότητα β_{i-1})

Βασικοί τύποι (συνέχεια)

Ο υπολογισμός των $p_i^{(k)}$ ανάγεται στον καθορισμό των ποσοτήτων α_i and β_{i-1}.
Υπόθεση:

Η πιθανότητα εύρεσης ενός από τα w τοπικά ελάχιστα με την εφαρμογή τοπικής ελαχιστοποίησης είναι $p = \frac{1}{w}$.

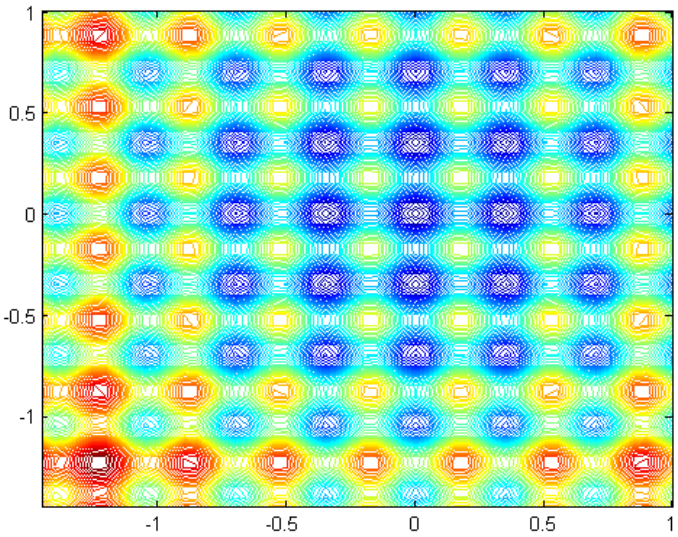
Όλα τα ελάχιστα βρίσκονται με την ίδια πιθανότητα

Η υπόθεση

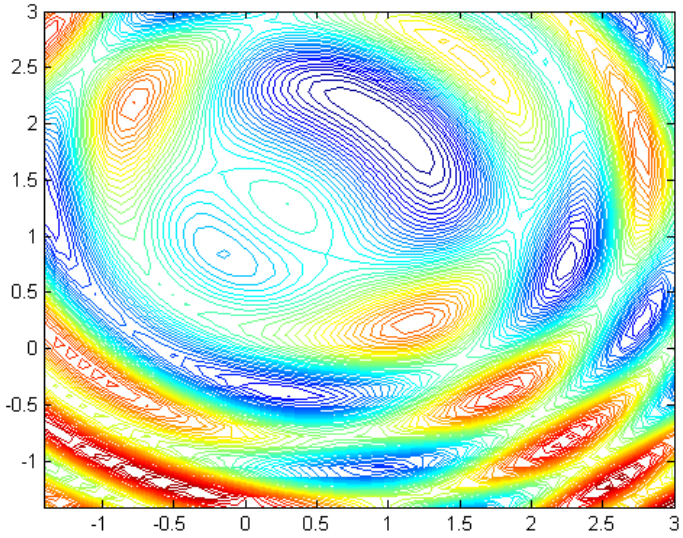
- $\alpha_i = \frac{i}{w}$
- $\beta_{i-1} = \frac{w-(i-1)}{w}$

Η παραπάνω υπόθεση ισχύει ακριβώς για την περίπτωση του ιδανικού Αλγορίθμου με τοπική ελαχιστοποίηση. Στην περίπτωση στοχαστικών αλγορίθμων ομαδοποίησης ο στόχος είναι μια τοπική ελαχιστοποίηση ανά ελάχιστο και συνεπώς όλα τα ελάχιστα τείνουν να βρεθούν ισοπίθανα.

Παράδειγμα ελαχίστων με διαφορετικά χαρακτηριστικά



(a) Τα ελάχιστα βρίσκονται με ίση πιθανότητα



(b) Τα ελάχιστα βρίσκονται με διαφορετικές πιθανότητες

Πρακτική υλοποίηση του κριτηρίου τερματισμού

Έστω $N_{found}^{(i)}$ ο πραγματικός αριθμός των διαφορετικών ελαχίστων στην i-th επανάληψη. Τότε η ποσότητα:

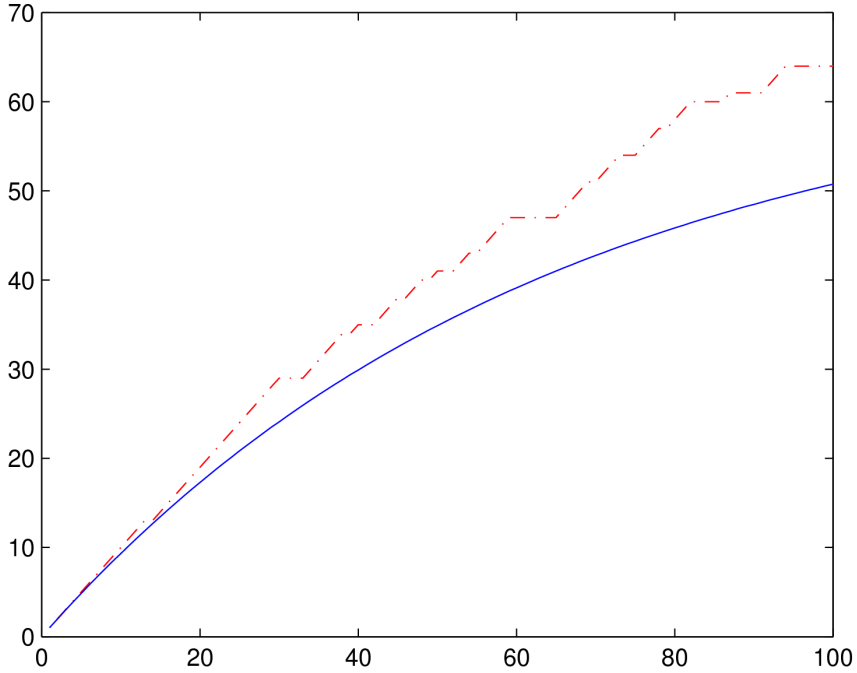
$$d_{MSE} = \frac{1}{iter} \sum_{i=0}^{iter} \left(< N^{(i)} > - N_{found}^{(i)} \right)^2$$

μειώνεται σταδιακά προς το μηδέν.
Παράδειγμα μεταβολής της ποσότητας d_{MSE}:

Επανάληψη	Ευρεθέντα ελάχιστα	d_{MSE}	Variance του d_{MSE}
100	64	78.949828	205.044716
200	94	72.086818	3 6.688531
300	110	52.139962	9.248131
400	116	28.281410	2.063600
500	119	10.676961	0.443810
600	121	9.770836	0.095597
700	121	5.789973	0.018181
800	121	2.525016	0.003458
900	121	1.101163	0.000658

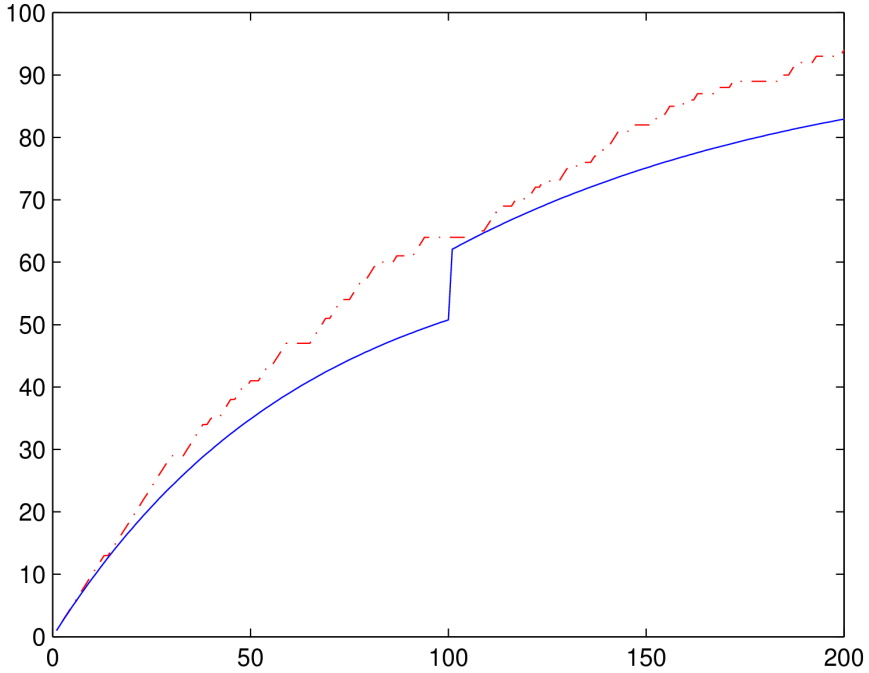
Table:

Illustration



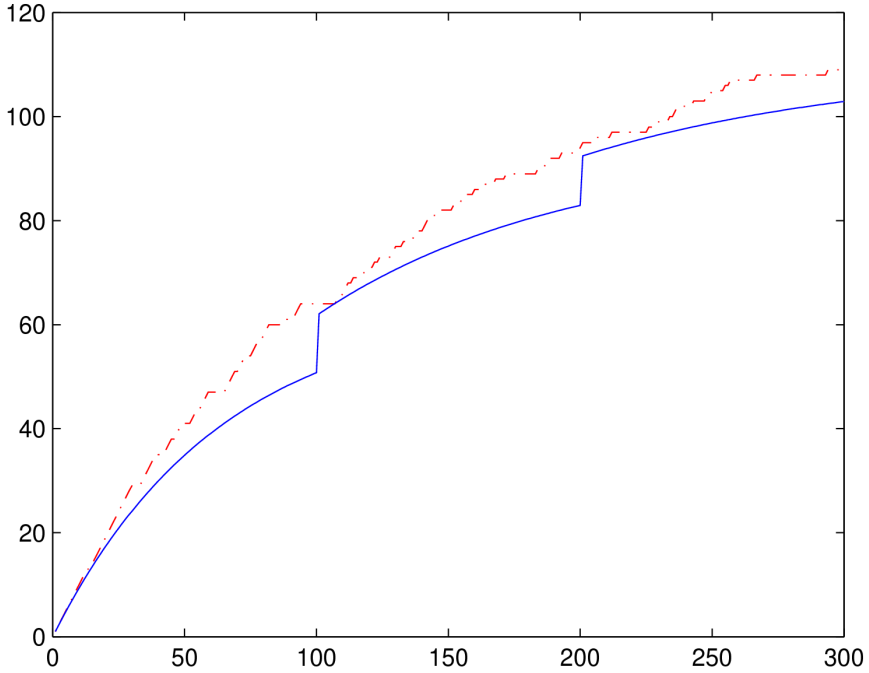
(c) Iter 100

Illustration



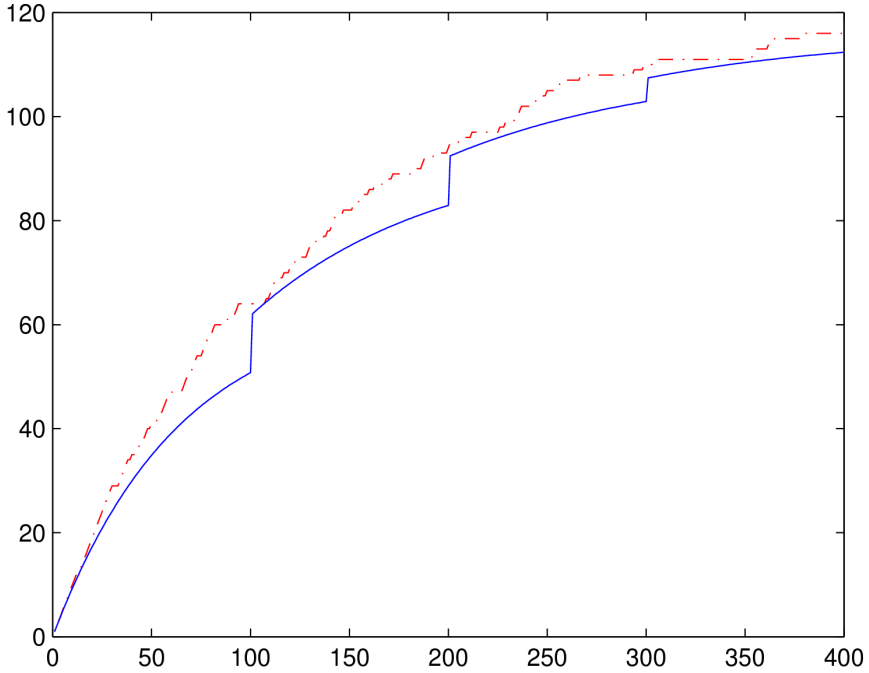
(d) Iter 200

Illustration



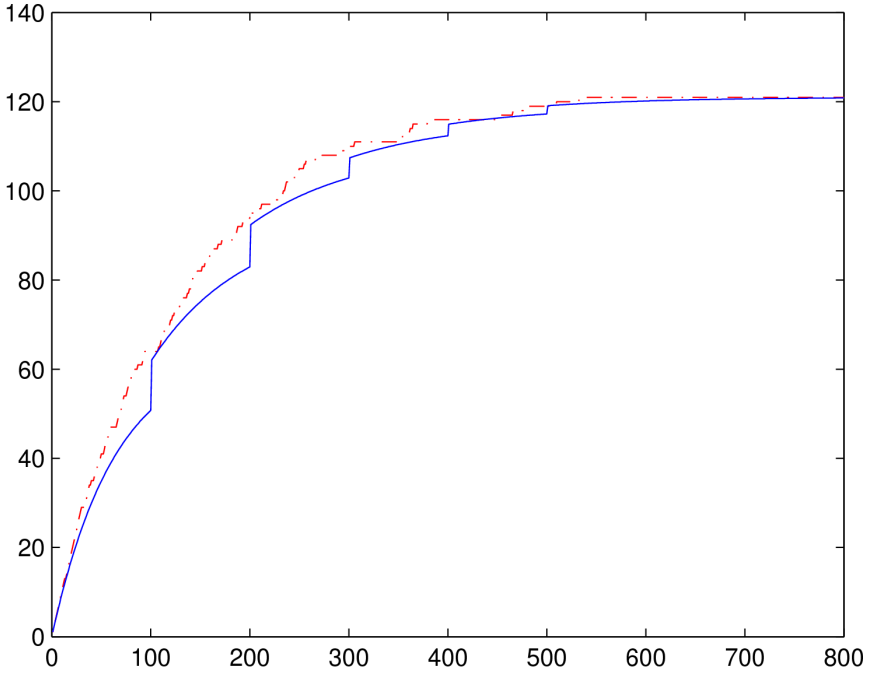
(e) Iter 300

Illustration



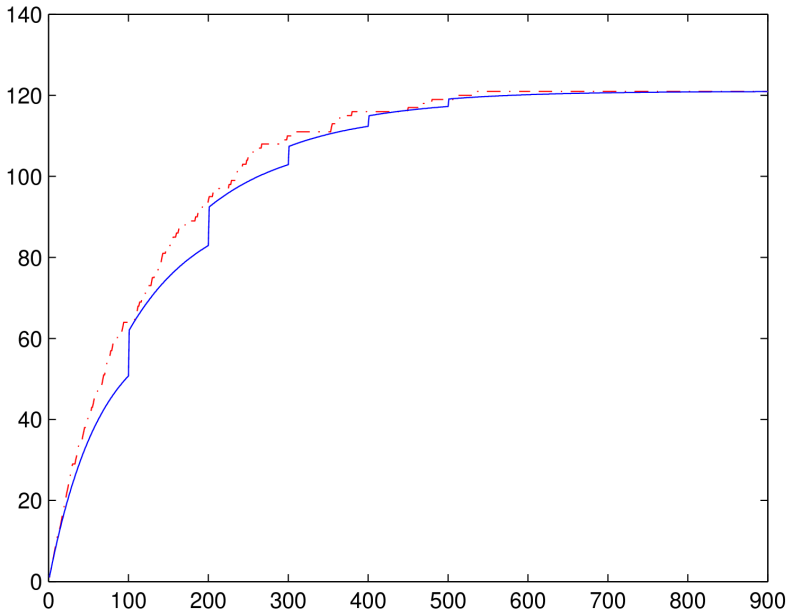
(f) Iter 400

Illustration



(g) Iter 800

Illustration



(h) Iter 900

Πειραματική σύγκριση

Function	Zielinski		Rinnoy-Kan		Tsoulos-Lagaris		Proposed	
	nom	nloc	nom	nloc	nom	nloc	nom	nloc
Rast(121)	121	3843	121	14886	121	2129	121	1500
Ack(49)	49	1566	49	2502	48.6	1079	48.6	615
Gri(123)	123	3906	123	15378	123	1842	123	1500
Lev3(130)	130	4128	130	17163	130	2078	130	1605
Lev5(130)	130	4128	130	17163	130	2206	130	1605
Lag(64)	63.8	2035	64	4227	63.95	2859	62.8	845
R-G(94)	92.65	2947	93.2	8875.8	92.6	4503	91.65	1185
M0(152)	151.45	4806	154.45	20000	152.55	11265	152	1920
M5(441)	440.9	13959	440.85	20000	440.85	18623	439	5800
She(10)	10	333	10	123	10	158.2	10	200
Bir(25)	24.95	805	24.8	668	22.8	659	24.85	420
Tub(45)	45	1440	45	2118	45	483	45	600
Dej(64)	62.65	1997	63	4099	62.2	1134	63	800
Hol(180)	180	5709	180	20000	180	2881	180	2300
Pic(37)	37	1187	37	1446	37	1036	37	520

Part II

Τοπική Ελαχιστοποίηση

Κυρτός τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια στις μεταβλητές

Ορισμός προβλήματος

Το πρόβλημα του κυρτού τετραγωνικού προγραμματισμού με απλά όρια στις μεταβλητές ορίζεται:

$$q(x) = \min_x \ \frac{1}{2}x^T Bx + x^T d, \tag{1}$$

υπό τον περιορισμό: $a_i \leq x_i \leq b_i, \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, n\}$

όπου $x, d \in R^n$ και B είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος $n \times n$ πίνακας.

Συνθήκες ύπαρξης ελαχίστου (KKT conditions)

Η συνάρτηση Lagrange

$$L(x, \lambda, \mu) = \frac{1}{2}x^T Bx + x^T d - \lambda^T (x - a) - \mu^T (b - x)$$

Συνθήκες ύπαρξης ελαχίστου

$$Bx^* + d - \lambda^* + \mu^* = 0 \quad (1)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad \mu_i^* \geq 0, \ \forall i \in I \quad (2)$$

$$\lambda_i^* (x_i^* - a_i) = 0, \ \forall i \in I \quad (3)$$

$$\mu_i^* (b_i - x_i^*) = 0, \ \forall i \in I \quad (4)$$

$$x_i^* \in [a_i, b_i], \ \forall i \in I \quad (5)$$

Ενεργό σύνολο στο ελάχιστο A

$$A = \{i \in I : \mu_i^* \geq 0 \text{ και } \lambda_i^* \geq 0\}$$

The Algorithm (I)

Algorithm BOXCQP

Initially set: $k = 0$, $\lambda^{(0)} = \mu^{(0)} = 0$ and $x^{(0)} = -B^{-1}d$.
If $x^{(0)}$ is feasible, **Stop**, the solution is: $x^* = x^{(0)}$.
At iteration k, the quantities $x^{(k)}, \lambda^{(k)}, \mu^{(k)}$ are available.

1. Define the sets:

$$\begin{aligned} L^{(k)} &= \{i : x_i^{(k)} < a_i, \text{ or } x_i^{(k)} = a_i \text{ and } \lambda_i^{(k)} \geq 0\} \\ U^{(k)} &= \{i : x_i^{(k)} > b_i, \text{ or } x_i^{(k)} = b_i \text{ and } \mu_i^{(k)} \geq 0\} \\ S^{(k)} &= \{i : a_i < x_i^{(k)} < b_i, \text{ or } x_i^{(k)} = a_i \text{ and } \lambda_i^{(k)} < 0, \\ \text{or} \quad & x_i^{(k)} = b_i \text{ and } \mu_i^{(k)} < 0\} \end{aligned}$$

   Note that $L^{(k)} \cup U^{(k)} \cup S^{(k)} = I$

2. Set:

$$\begin{aligned} x_i^{(k+1)} &= a_i, \ \mu_i^{(k+1)} = 0, \quad \forall i \in L^{(k)} \\ x_i^{(k+1)} &= b_i, \ \lambda_i^{(k+1)} = 0, \quad \forall i \in U^{(k)} \\ \lambda_i^{(k+1)} &= 0, \ \mu_i^{(k+1)} = 0, \quad \forall i \in S^{(k)} \end{aligned}$$

The Algorithm (II)

3. Solve:

$$Bx^{(k+1)} + d = \lambda^{(k+1)} - \mu^{(k+1)}$$

for the n unknowns:

$$x_i^{(k+1)}, \ \forall i \ \in S^{(k)}$$
$$\mu_i^{(k+1)}, \ \forall i \ \in U^{(k)}$$
$$\lambda_i^{(k+1)}, \ \forall i \ \in L^{(k)}$$

4. Check if the new point is a solution and decide to either stop or iterate.

If $(x_i^{(k+1)} \in [a_i, b_i] \ \forall i \in S^{(k)}$ **and** $\mu_i^{(k+1)} \geq 0, \ \forall i \in U^{(k)}$
and $\lambda_i^{(k+1)} \geq 0, \ \forall i \in L^{(k)})$ **Then**
Stop, the solution is: $x^* = x^{(k+1)}$.
Else
set $k \leftarrow k+1$ and iterate from **Step 1.**
Endif

Ανταγωνιστικοί αλγόριθμοι

- Υλοποίηση σε MATLAB
  - **MOSEK** Εμπορικό προϊόν.
  - **Quadprog** Προϊον της MATLAB
  - **MINQ** από τον A. Neumaier του Πανεπιστημίου της Βιέννης
  - **QPOPT** των Gill και Murray
- Υλοποίηση Fortran
  - **QPBOX** από την ομάδα βελτιστοποίησης του Technical University of Denmark.
  - **QLD** από τον K.Schittkowski του University of Bayreuth, Germany.
  - **QUACAN** από τους Friedlander και Martinez του University of Campinas, Brazil

Prob. Name	Var.1	Var.2	Var.3	QUACAN	QPBOX	QLD
SVM ($n = 100$)	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
SVM ($n = 200$)	0.0430	0.0352	0.0391	0.1523	0.0703	0.0742
SVM ($n = 300$)	0.1367	0.0977	0.1016	0.3945	0.2305	0.2539
SVM ($n = 400$)	0.3672	0.2891	0.3359	2.0039	0.5352	0.6289
SVM ($n = 500$)	0.7031	0.6133	0.7070	4.6914	1.0508	1.2734
SVM ($n = 600$)	1.1797	0.8398	0.9727	6.5430	1.8516	2.3633
SVM ($n = 700$)	2.2656	1.5078	1.8516	14.3320	3.0273	3.8125
SVM ($n = 800$)	3.3789	1.8750	2.2539	21.7461	4.6836	6.1953
SVM ($n = 900$)	5.6680	3.3984	3.8438	27.1602	7.3281	8.2031
SVM ($n = 1000$)	7.2578	4.2930	5.0117	34.0078	10.3945	11.3281
SVM ($n = 2000$)	68.7852	22.0078	36.2461	256.2266	77.2969	104.3086
SVM ($n = 3000$)	263.3477	63.9688	151.4023	1068.9766	264.5586	354.4297
Tent ($n = 100$)	0.0078	0.0039	0.0039	0.0039	*N.C*	0.0039
Tent ($n = 400$)	0.322	0.132	0.217	*N.C*	*N.C*	0.248
Tent ($n = 900$)	5.570	1.453	3.273	*N.C*	*N.C*	2.77
Tent ($n = 1600$)	48.3008	9.5742	29.1133	*N.C*	*N.C*	20.5352
Tent ($n = 3600$)	557.74	55.74	284.05	*N.C*	*N.C*	246.04
Tent ($n = 4900$)	1333.51	150.49	696.21	*N.C*	*N.C*	617.58
Biharm ($n = 100$)	0.0030	0.0030	0.0020	0.0040	0.0120	0.0130
Biharm ($n = 400$)	0.1958	0.2090	0.1880	0.6450	0.6382	0.7539
Biharm ($n = 900$)	4.2788	3.1328	2.9180	18.5229	10.4912	9.2886
Biharm ($n = 1600$)	23.3280	17.8920	15.3110	119.6610	82.1220	60.8680
Biharm ($n = 2500$)	106.1869	77.2411	60.5740	775.0340	333.9110	222.7870
Biharm ($n = 3600$)	308.7246	271.4639	186.8857	2988.0826	1071.3447	684.5688
Biharm ($n = 4900$)	816.13	705.52	484.45	8282.04	3067.21	1837.66
IMRT ($n = 2342$)	54.22	33.11	40.56	85.11	67.88	73.22

Χρόνοι εκτέλεσης σε δευτερόλεπτα

Μέθοδος μη-γραμμικού προγραμματισμού βασισμένη σε ορθογώνιες περιοχές εμπιστοσύνης

Αλγόριθμοι περιοχών εμπιστοσύνης

Εφαρμόζονται σε προβλήματα:

$$\min f(x) \quad \text{υπό τον περιορισμό } a_i \leq x_i \leq b_i \ \forall i = 1, 2, \ldots, n$$

Προσέγγιση της $f(x)$

$$f(x_k + s) \approx m_k(s) = f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s \tag{6}$$

όπου $g_k = \nabla f(x_k)$ and B_k συμμετρική προσέγγιση του $\nabla^2 f(x_k)$.
Η περιοχή εμπιστοσύνης ορίζεται:

$$\mathbf{T}_k = \{x \in \Re^n \mid ||x - x_k|| \leq \Delta_k\} \tag{7}$$

Προφανώς διαφορετικές επιλογές της νόρμας οδηγούν σε διαφορετικά σχήματα των περιοχών εμπιστοσύνης. πχ Η Ευκλείδεια νόρμα $||\cdot||_2$, αντιστοιχεί σε υπερσφαίρα, ενώ η άπειρη νόρμα $||\cdot||_\infty$ αντιστοιχεί σε υπερορθογώνιο.

Ορθογώνιες περιοχές εμπιστοσύνης

Η επιλογή ορθογώνιας περιοχής εμπιστοσύνης

$$\min_s m_k(s) = f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s, \quad \text{υπό τον περιορισμό: } ||s||_\infty \leq \Delta_k$$

$$\min_s m_k(s) = f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s, \quad \text{υπό τον περιορισμό: } -\Delta_k \leq \max_i s_i \leq \Delta_k$$

- Προφανής επιλογή για προβλήματα με απλά όρια

$$\min_{x \in \mathcal{R}^n} f(x) \quad \text{subject to } a_i \leq x_i \leq b_i$$

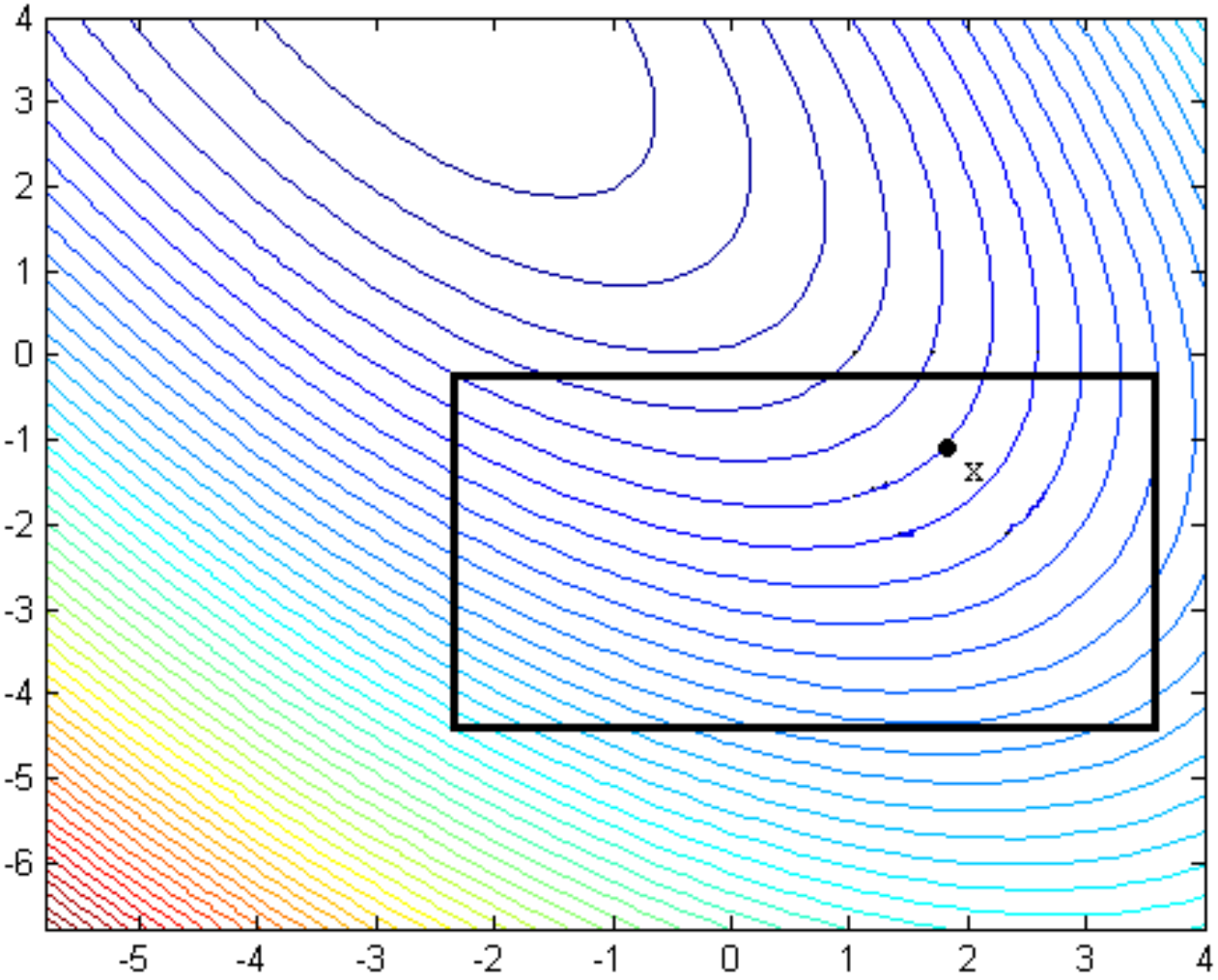
Τελικό πρόβλημα

$$\min_s \qquad m_k(s) = f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s,$$

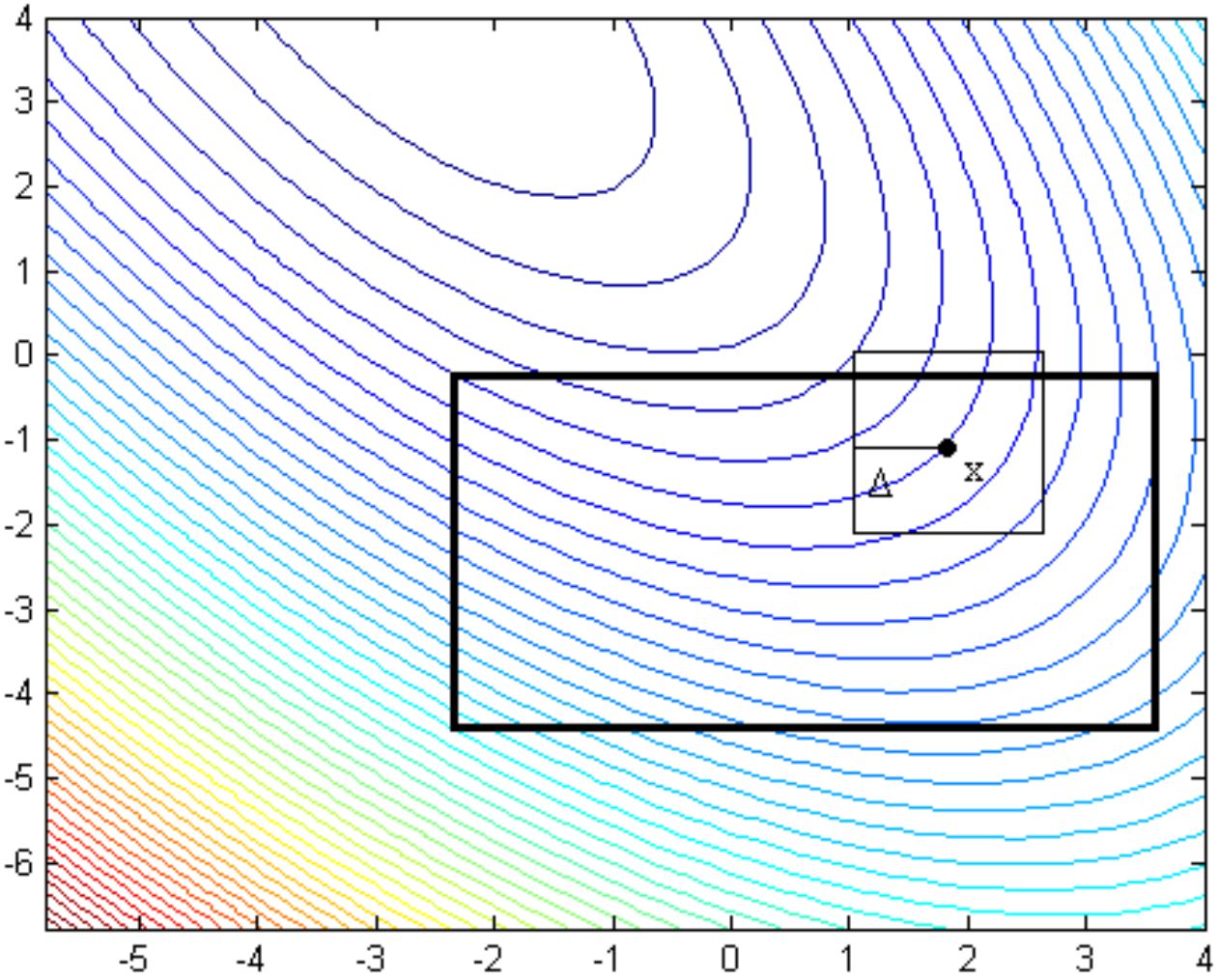
$$\text{υπό τον περιορισμό:} \qquad \max(a_i - (x_k)_i, -\Delta_k) \leq s_i \leq \min(b_i - (x_k)_i, \Delta_k)$$

εφόσον το σημείο $x_k + s_k$ πρέπει να βρίσκεται εντός ορίων.

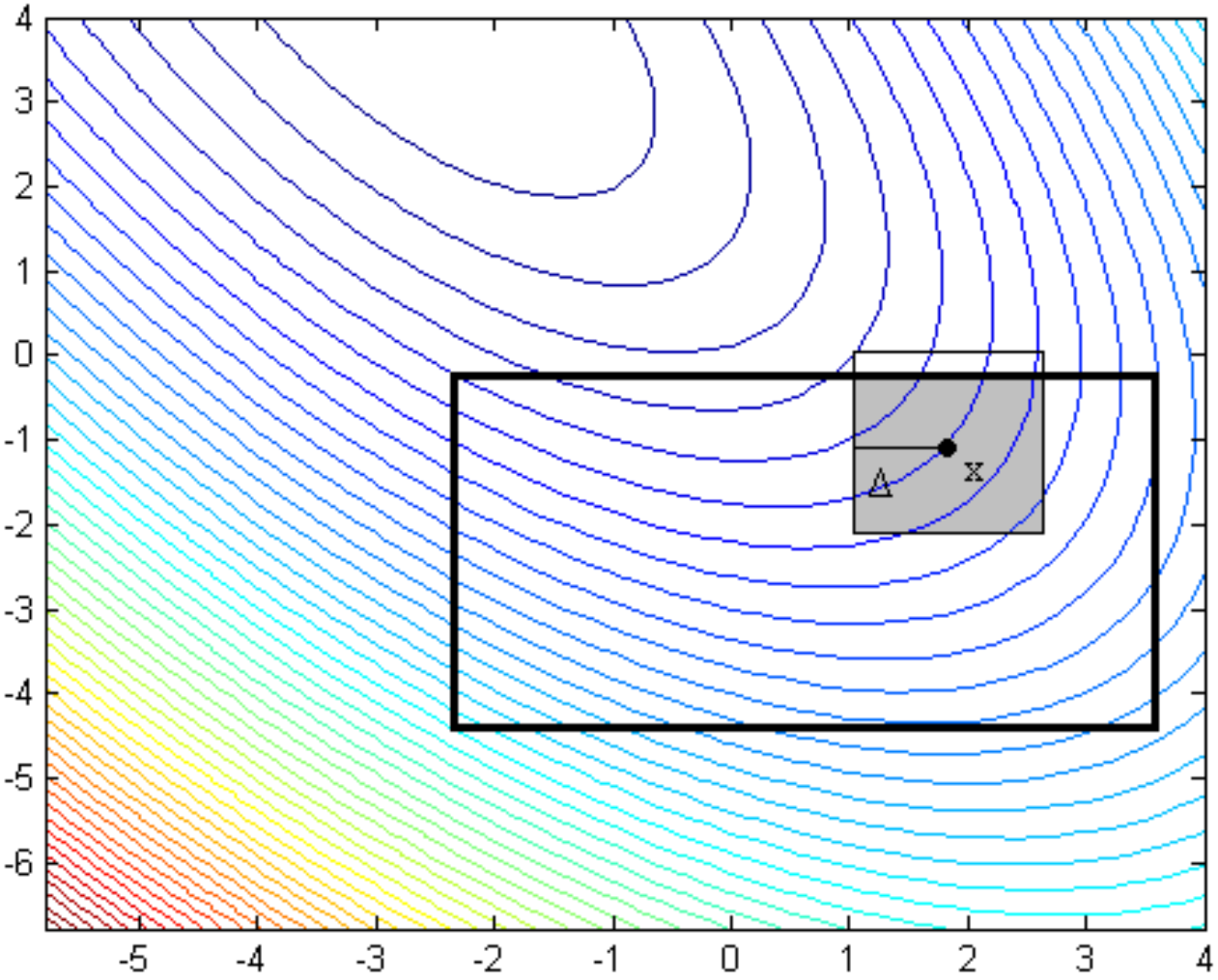
Παράδειγμα



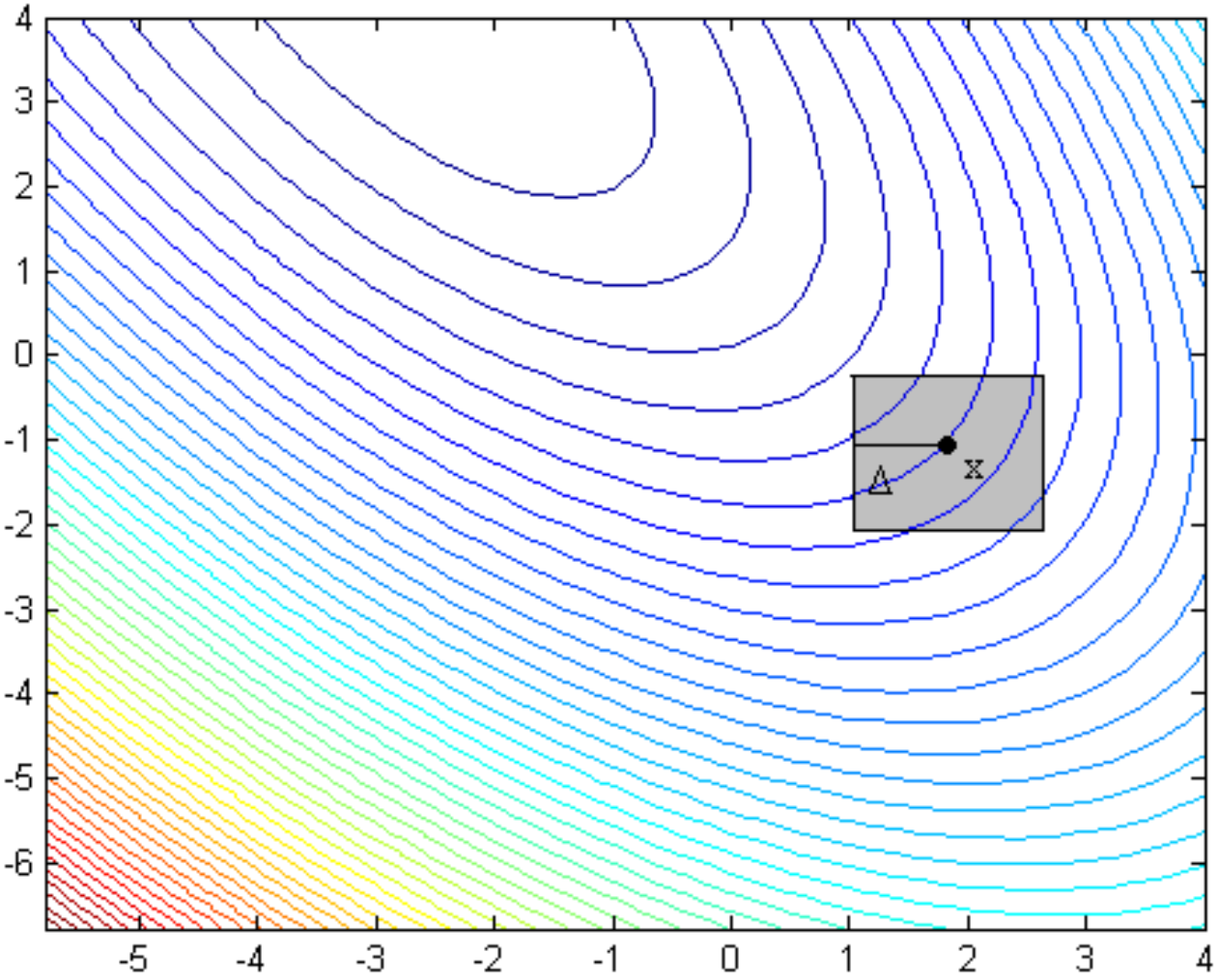
Παράδειγμα



Παράδειγμα



Παράδειγμα



Παραλλαγή λύσης με μονοπάτι Dogleg

- Η συνάρτηση $m_k(s)$ μειώνεται συνεχώς κατά το μονοπάτι Dogleg εφόσον ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος.
- Μπορούμε να ξεχωρίσουμε 3 περιπτώσεις:

  Case 1: $N \in T_k$
  Case 2: $C \in T_k$ and $N \notin T_k$
  Case 3: $C \notin T_k$ and $N \notin T_k$

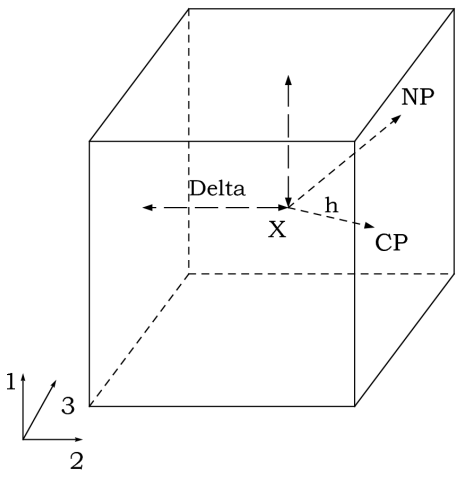
  - Κλασικό Dogleg: Δέχεται την προβολή του σημείου Cauchy
  - **Προτεινόμενη αντιμετώπιση: Ξεκινάμε από το σημείο** N **και ακολουθούμε την διεύθυνση** $-PC$ **μέχρι να συναντήσουμε το όριο**

Τελικός τύπος μονοπατιού Dogleg

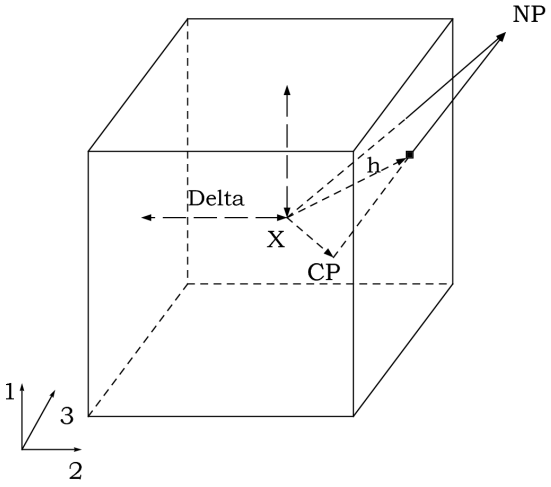
$$s(\lambda) = \begin{cases} \lambda C & \text{for } 0 \leq \lambda \leq b \\ bC + (\lambda - b)(N - bC) & \text{for } b \leq \lambda \leq 1 + b \end{cases}$$

where $b = \frac{||PC||_2}{||C||_2} \in [0, 1]$.

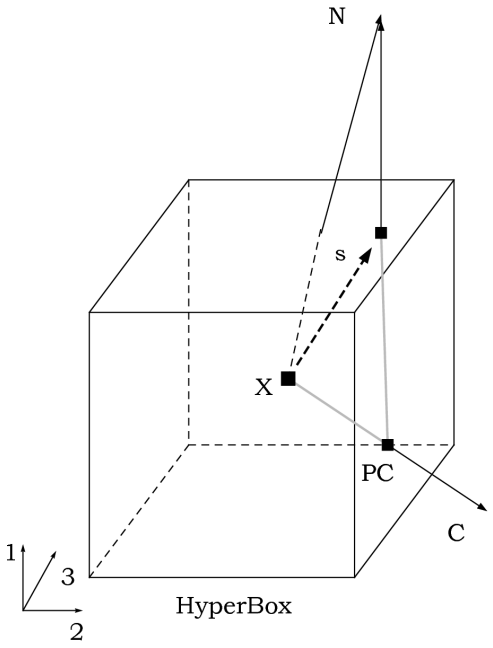
Τρεις περιπτώσεις του μονοπατιού Dogleg



Περίπτ. 1



Περίπτ. 2



Περίπτ. 3

Επίλυση του :

Κυρτού τετραγωνικού υποπροβλήματος

$$\begin{aligned} \min_s \quad & f(x_k) + g_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s, \\ \text{subject to:} \quad & \max(a_i - (x_k)_i, -\Delta_k) \leq s_i \leq \min(b_i - (x_k)_i, \Delta_k) \end{aligned}$$

με την μέθοδο που περιγράψαμε στην προηγούμενη ενότητα.

Μονοπάτι Dogleg - Προβλήματα με περιορισμούς

Problem Name	Test Point 1								Test Point 2							
	TRUST			BOXDOG			TOLMIN		TRUST			BOXDOG			TOLMIN	
	It.	FC	GC	It.	FC	GC	FC	GC	It.	FC	GC	It.	FC	GC	FC	GC
ROSEN	6	39	6	2	2	2	3	2	5	11	6	2	2	2	3	2
FRE-ROT	39	84	39	2	2	2	3	2	1	2	1	2	2	2	3	2
POW-B-S	11	29	11	2	2	2	3	2	13	32	13	3	3	3	5	4
BROW-B-S	8	65	8	3	48	3	37	36	6	63	6	3	3	3	4	3
BEAL	46	93	46	3	3	3	4	3	1	2	1	3	3	3	4	3
JEN-SAM	1	2	1	3	3	3	5	4	1	13	2	3	3	3	6	5
GAUS	15	16	15	7	18	8	14	15	56	73	56	9	9	9	31	32
MEYE	63	117	63	20	47	20	25	24	-	-	-	12	12	12	23	22
GULF	50	100	50	6	6	6	8	7	50	97	50	10	10	10	8	7
BOX3	5	5	6	4	4	4	5	4	7	32	7	4	4	4	5	4
POW-SI	-	-	-	4	4	4	5	4	-	-	-	3	3	3	4	3
KOW-OSB	68	84	68	13	13	13	20	19	58	105	58	7	7	7	8	7
BRO-DEN	1	9	2	3	3	3	7	6	1	12	2	3	3	3	5	4
OSB1	66	115	66	250	339	250	19	18	-	-	-	11	11	11	16	15
BIG-EX	53	70	53	10	11	10	19	18	30	46	30	16	32	16	27	26
OSB2	73	91	73	33	53	33	59	58	58	76	58	14	30	14	22	21
WATS	1	0	0	0	0	0	0	0	1	3	2	21	21	21	42	41
X-ROSE	7	33	7	2	2	2	3	2	6	40	6	2	2	2	3	2
X-POW-S	-	-	-	6	6	6	6	5	-	-	-	3	3	3	4	3
PEN1	2	36	2	5	5	5	6	5	1	2	1	5	5	5	6	5
PEN2	50	97	50	5	5	5	10	9	90	136	90	5	5	5	7	6
VAR-DIM	22	82	22	10	10	10	11	10	20	70	20	10	10	10	11	10
TRIG	61	78	61	19	36	19	33	32	53	99	53	11	11	11	13	12
BR-A-LIN	8	41	8	3	3	3	4	3	0	0	0	0	0	0	0	0
DISC-BOUN	-	-	-	20	35	20	39	38	0	0	0	0	0	0	0	0
LIN-FR	46	90	46	2	2	2	3	2	45	89	45	2	2	2	3	2
LIN-R1	1	5	2	11	11	11	12	11	1	7	2	11	11	11	12	11
LIN-R10	1	4	2	9	9	9	10	9	1	6	2	9	9	9	10	9
CHEB	49	69	49	44	66	44	60	59	74	143	74	52*	96	52	86	85

Ακριβής επίλυση - Προβλήματα με περιορισμούς

Problem Name	Test Point 1								Test Point 2							
	TRUST			TRUSTQP			TOLMIN		TRUST			TRUSTQP			TOLMIN	
	It.	FC	GC	It.	FC	GC	FC	GC	It.	FC	GC	It.	FC	GC	FC	GC
ROSEN	24	60	24	14	17	14	17	16	26	66	26	5	5	5	11	10
FREU-ROT	16	44	16	9	9	9	28	27	42	99	42	3	3	3	5	4
BROW-B-S	7	64	7	3	44	3	15	14	14	78	14	3	3	3	4	3
BEAL	-	-	-	8	24	8	20	19	1	2	1	2	2	2	3	2
JEN-SAM	-	-	-	27	54	27	55	54	-	-	-	20	50	20	67	66
GAUS	9	9	9	7	18	7	14	13	49	52	41	14	28	15	33	32
MEYE	62	116	62	12	24	12	27	26	79	170	79	47	60	47	22	21
BOX3	6	35	6	4	4	4	5	4	7	35	7	5	5	5	6	5
POW-SI	63	94	63	17	37	17	45	44	-	-	-	10	41	10	23	22
KOW-OSB	36	52	36	33	43	33	48	47	41	57	41	44	64	44	46	45
BRO-DEN	-	-	-	5	5	5	10	9	-	-	-	5	5	5	8	7
OSB1	76	102	76	70	93	70	103	102	300	300	300	91	124	91	99	98
BIG-EX	31	47	31	21	38	21	31	30	28	45	28	17	34	17	36	35
OSB2	84	106	84	54	78	54	91	90	53	69	53	19	37	19	39	38
X-ROSE	34	72	34	36	53	36	41	40	77	130	77	11	40	11	42	41
X-POW-S	79	118	79	32	61	32	56	55	-	-	-	9	34	9	27	26
PEN1	1	2	1	7	7	7	13	12	1	2	1	5	5	5	6	5
VAR-DIM	202	258	202	1	2	1	3	2	-	-	-	18	19	18	37	36
TRIG	28	41	28	32	47	32	53	52	*	*	*	*	*	*	*	*
BR-A-LIN	-	-	-	17	35	17	34	33	1	0	0	1	0	0	0	0
DISC-BOUN	27	30	27	33	35	33	46	45	32	34	32	34	37	35	50	49
DISC-INT	25	25	25	25	25	25	31	30	27	27	27	26	26	26	33	32
BROY-TRI	60	78	60	64	98	64	48	47	27	69	27	12	12	12	30	29
BROY-BAN	88	119	88	68	109	68	88	87	26	76	26	11	11	11	26	25
LIN-FR	48	93	48	2	2	2	3	2	47	92	47	2	2	2	3	2
LIN-R1	-	-	-	12	12	12	21	20	1	9	2	11	11	11	12	11
LIN-R10	-	-	-	10	10	10	19	18	1	8	2	9	9	9	10	9
CHEB	44	66	44	42	66	42	53	52	*	*	*	*	*	*	*	*

Δημοσιευμένες εργασίες

Τοπογραφικά προσαρμοστική στοχαστική αναζήτηση

- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, Towards ``Ideal Multistart''. A stochastic approach for locating the minima of a continuous function inside a bounded domain, Applied Mathematics and Computation
- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, Global Optimization by Adaptively Estimating the Probability for Local Search, Optimization 2007, Porto, Portugal, 2007.

Ομαδοποίηση βασισμένη σε φασματική ανάλυση

- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, Smeenos: A Clustering Algorithm for Recovering the Local Minima of a Function, Optimization 2007, Porto, Portugal, 2007.

Τετραγωνικός προγραμματισμός με απλά όρια στις μεταβλητές

- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, BOXCQP: An Algorithm for Bound Constrained Convex Quadratic Problems , 1st International Conference ``From Scientific Computing to Computational Engineering'', Athens, Greece, 2004.

Περιοχη εμπιστσύνης με απλά όρια στις μεταβλητές

- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, A Rectangular Trust Region Dogleg Approach for Unconstrained and Bound Constrained Nonlinear Optimization, WSEAS International Conference on Applied Mathematics, Corfu, Greece, 2004.
- **C. Voglis** and I. E. Lagaris, A Rectangular Trust-Region Approach for Unconstrained and Box-Constrained Optimization Problems, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Athens, Greece, 2004.

Published work

Εφαρμογές

- **C. Voglis** and I.E. Lagaris, A Global Optimization Approach to Neural Network Training, *Neural, Parallel & Scientific Computations* **14**:231--240, 2006.
- M.G. Tsipouras, **C. Voglis** and D.I. Fotiadis, A Framework for Fuzzy Expert System Creation Application to Cardiovascular Diseases, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, (**54**):2089--2105, 2007.
- C.Papadopoulos and **C. Voglis**, Drawing Graphs using Modular Decomposition, *Journal of Graph Algorithms and Applications* **11**(2): 481--511, 2007.
- **C. Voglis**, I.E. Lagaris, M.L. Lekala, G.J. Rampho and S.A. Sofianos, Global minimization in few-body systems, *Nuclear Physics* **790**:655--658, 2007.

Λογισμικό

- **C. Voglis** P. Hadjidoukas, D. Papageorgiou and I. E. Lagaris, A Numerical Differentiation Library Exploiting Parallel Architectures. (accepted for publication in *Computer Physics Communications*)