



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών
Επιστημών

**Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς με την χρήση
τεχνικών Trust Region**

Άγγελος Ανδρέας Γιούλης

Επιβλέπων καθηγητής: Κωνσταντίνος Χρυσάφινος

Ημερομηνία: 19 Φεβρουαρίου 2024

Πρόλογος

Ξεκινώντας, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον κ.Χρυσάφινο, αρχικά διότι δέχθηκε να αναλάβει την επίβλεψη της διπλωματικής μου εργασίας παρέχοντας μου ένα άκρως ενδιαφέρον θέμα πάνω στο πεδίο της βελτιστοποίησης και έπειτα για την συνεχή καθοδήγηση και την παροχή βοήθειας όπου χρειάστηκε, μετατρέποντας την επίβλεψη της εργασίας σε μια άριστη συνεργασία και ελπίζω το αποτέλεσμα της, να αντικατοπτρίζει τα παραπάνω.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την συνεχή στήριξη ώστε να κυλήσει ομαλά η εκπόνηση της εργασίας, καθώς και τους φίλους μου οι οποίοι υπήρξαν στήριγμα καθόλη την διάρκεια, όχι μόνο της διπλωματικής εργασίας, αλλά ολόκληρων των σπουδών μας.

Περίληψη

Οι τεχνικές τύπου Trust Region είναι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, κατά τις οποίες επιλέγεται ένα υποψήφιο βήμα για κάθε επανάληψη, εκτελώντας ελαχιστοποίηση ενός τετραγωνικού μοντέλου της αντικειμενικής συνάρτησης σε μια περιοχή που εμπιστευόμαστε ότι η προσεγγιστική συνάρτηση και η ακριβής συνάρτηση, έρχονται σε συμφωνία μεταξύ τους. Σε αντίθεση με τις τεχνικές τύπου Line Search οι οποίες παρουσιάζονται εξίσου, οι τεχνικές των αλγόριθμων Trust Region επιλέγουν ταυτόχρονα το βήμα της επόμενης επανάληψης καθώς και την κατεύθυνση που θα κινηθεί. Η ακτίνα της περιοχής αξιοπιστίας χρήζει εξέχουσας σημασίας, καθώς η επιλογή της κρίνει σε μεγάλο βαθμό, τι μείωση θα υπάρξει στην αντικειμενική συνάρτηση και πόσο καλά προσεγγίζει το τετραγωνικό μοντέλο την συνάρτηση, ώστε ο αλγόριθμος να αποδίδει σωστά. Ακόμα οι αλγόριθμοι των μεθόδων Trust Region αντιμετωπίζουν ικανοποιητικά μη κυρτά προβλήματα και προβλήματα που δεν είναι καλά ορισμένα. Σε αυτή την διπλωματική εργασία θα παραθέσουμε τρεις μεθόδους που χρησιμοποιούν τεχνικές τύπου Trust Region, ενώ θα προχωρήσουμε σε ανάλυση σύγκλισης των παραπάνω μεθόδων, δηλαδή θα αναφερθούμε στο τι απαιτείται με σκοπό να επιτευχθεί τοπική, αλλά και ολική σύγκλιση. Επιπλέον θα ελέγξουμε μέσα από αριθμητικά παραδείγματα αν οι αλγόριθμοι αποδίδουν σωστά και θα συγκρίνουμε αλγόριθμους τύπου Trust Region με αλγόριθμους άλλων τεχνικών όπως Line Search, ή μεθόδων Newton. Τέλος θα ελέγξουμε την συμπεριφορά των αλγόριθμων Trust Region για προβλήματα μεγάλης διάστασης.

Abstract

Trust Region methods are iterative methods that solve unconstrained optimization problems using a candidate step at each iteration by solving the minimization problem of a quadratic model of the objective function in a region that we trust the model to be an adequate representation of the actual objective function. In contrast to Line Search methods Trust Region methods choose the direction and the step length of the iteration simultaneously. The Trust Region radius is critical to the effectiveness of each iteration since its choice determines if sufficient reduction is achieved and if the quadratic model and objective function come in agreement. Trust Region algorithms can be applied to non convex and ill conditioned problems efficiently. In this diploma thesis we present three Trust Region algorithms and analyze their local and global convergence properties. Furthermore we implement some of the algorithms and present numerical results to compare Trust Region algorithms with other unconstrained optimization algorithms such as Line Search methods and Newton methods. We also check the effectiveness of the Trust Region algorithms in large scale problems.

Περιεχόμενα

1	Προαπαιτούμενες Γνώσεις	9
1.1	Σύνολα	9
1.2	Νόρμες και Πίνακες	10
1.3	Στοιχεία τοπολογίας και ανάλυσης	12
1.3.1	Ακρότατα	14
1.4	Ποσοστά Σύγκλισης	15
2	Προβλήματα Βελτιστοποίησης	16
2.1	Το γενικό πρόβλημα Βελτιστοποίησης	16
2.1.1	Μαθηματική Μοντελοποίηση	16
2.1.2	Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης	17
2.2	Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς	17
2.2.1	Λύση του προβλήματος Βελτιστοποίησης	17
2.3	Line Search Methods	20
2.3.1	Η γενική ιδέα της μεθόδου Line Search	21
2.3.2	Η μέθοδος Steepest Descent	23
2.3.3	Η μέθοδος Newton	24
2.3.4	Μέθοδοι Quasi-Newton	25
2.4	Μέθοδοι συζυγών κατευθύνσεων	27
2.4.1	Η μέθοδος των συζυγών κλίσεων	27
3	Trust Region Methods	30
3.1	Η γενική ιδέα της μεθόδου Trust Region	30
3.1.1	Trust Region Radius Δ_k	31
3.2	Trust Region Subproblem	33
3.2.1	Το σημείο Cauchy (Cauchy Point)	36
3.3	Η μέθοδος Dogleg για τεχνικές Trust Region	38
3.4	Two Dimensional Subspace Minimization	43
3.4.1	Περιπτώσεις για απροσδιόριστο πίνακα	43
3.4.2	Μη θετικά ορισμένοι πίνακες	44
3.5	Ο Αλγόριθμος συζυγών κλίσεων για τεχνικές Trust Region (CG Steihaug)	45
3.6	Ανάλυση Σύγκλισης Μεθόδων	48
3.6.1	Σύγκλιση της τετραγωνικής συνάρτησης	48
3.6.2	Ολική Σύγκλιση	50
3.6.3	Τοπική σύγκλιση των μεθόδων Trust Region τύπου Newton	55

4	Αριθμητικά Αποτελέσματα	58
4.1	Αριθμητικές εφαρμογές προβλημάτων χαμηλής διάστασης	59
4.2	Προβλήματα μεγάλης διάστασης	71
	Παράρτημα	82

Κατάλογος Πινάκων

4.1	Εξέλιξη της μεθόδου Newton	59
4.2	Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent	60
4.3	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_1(x)$	61
4.4	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την $f_1(x)$	62
4.5	Σύγκριση της απόδοσης των αλγορίθμων για την $f_1(x)$	62
4.6	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_2(x)$	63
4.7	Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την $f_2(x)$	64
4.8	Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent για την $f_2(x)$	65
4.9	Σύγκριση της απόδοσης των αλγορίθμων για την $f_2(x)$	65
4.10	Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την συνάρτηση Himmelblau	67
4.11	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για τη συνάρτηση Himmelblau	67
4.12	Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent για την $f_3(x)$	68
4.13	Σύγκριση των μεθόδων.	69
4.14	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg της συνάρτησης $f_4(x)$ για $n = 50$	70
4.15	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG Steihaug για $n=50$	71
4.16	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την συνάρτηση $f_5(x)$	72
4.17	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG Steihaug για την $f_3(x)$	72
4.18	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_6(x)$	73
4.19	Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την $f_6(x)$	74
4.20	εξέλιξη της μεθόδου dogleg για $f_7(x)$ με $n=10000$	75
4.21	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_7(x)$	75
4.22	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_5(x)$	76
4.23	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_5(x)$	77
4.24	Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την συνάρτηση rastrigin, $n = 10000$	78
4.25	Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση rastrigin	79
4.26	Επίδοση των αλγορίθμων βάσει επαναλήψεων	80

Κατάλογος Εικόνων και Γραφικών

3.1	Trust Region και Contours της αντικεμενικής συνάρτησης [βλ. [6], Figure 6.4.1]	31
3.2	Το βήμα της μεθόδου Dogleg [βλ. [13], Figure 4.4]	39
4.1	Rosenbrock Function Plots	59
4.2	Η σφαιρική περιοχή αξιοπιστίας (Trust Region) και η πρώτη επανάληψη Dogleg	61
4.3	Γράφημα εξέλιξης των τιμών για $f_2(x), \ \nabla f_2\ $	63
4.4	Himmelblau Function Plots	66
4.5	Η διαδρομή του αλγόριθμου Dogleg για τη συνάρτηση Himmelblau	68
4.6	Γράφημα εξέλιξης των τιμών για $f_6(x), \ \nabla f_6\ $	74
4.7	3D plot της συνάρτησης Rastrigin	77

Εισαγωγή

Η αριθμητική βελτιστοποίηση στο πεδίο των μαθηματικών έχει εγκαθιδρυθεί ως ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο στην επίλυση προβλημάτων για διάφορους τομείς. Πρώτο βήμα προς την βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης, είναι η μετατροπή των δεδομένων σε μαθηματικούς όρους, μια διαδικασία που καλείται μαθηματική μοντελοποίηση. Χωρίζουμε δηλαδή το πρόβλημα σε: μεταβλητές x_i , αντικειμενική συνάρτηση $f(x)$ (την οποία θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε ή να μεγιστοποιήσουμε) και στο σύνολο των περιορισμών. Σε αυτή την διπλωματική, εργαζόμαστε πάνω σε αλγόριθμους βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Το γενικό πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς μπορεί να γραφεί μέσω της μορφής:

$$\min_{x \in \mathcal{R}^n} f(x)$$

με $n \geq 1$, δηλαδή στοχεύουμε στην εύρεση της ελάχιστης τιμής της συνάρτησης f σε ολόκληρο τον χώρο πραγματικών μεταβλητών, διάστασης n , μέσω επαναληπτικών αλγόριθμων. Οι δημοφιλέστερες τεχνικές που χρησιμοποιούνται για επίλυση τέτοιων προβλημάτων χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, στις τεχνικές τύπου Trust Region και τεχνικές τύπου Line Search. Η ιδέα των τεχνικών Trust Region είναι στενά συνδεδεμένη με την προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης. Ενδέχεται να χρησιμοποιηθεί και σε τεχνικές Line Search κάποιου είδους προσεγγιστικό μοντέλο για την αντικειμενική συνάρτηση, ωστόσο στις μεθόδους Trust Region το μοντέλο προσέγγισης είναι αξιόπιστο μόνο σε μια συγκεκριμένη περιοχή που ορίζουμε και συγκεκριμένα σε αυτή την εργασία η περιοχή αξιοπιστίας είναι σφαιρική. Οι βασικές έννοιες που μας απασχολούν είναι, πως να υπολογίσουμε ένα υποψήφιο βήμα επανάληψης καθώς και πότε πρέπει να γίνει αποδεκτό το συγκεκριμένο βήμα. Οι τεχνικές τύπου Trust Region άρχισαν να μελετώνται αργότερα συγκριτικά με τις τεχνικές Line Search, δηλαδή θεωρούνται ως μια πιο νέα τεχνική βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, είναι όμως εύχρηστες και αξιόπιστες με χρήση σε μεγάλο εύρος προβλημάτων όπως μη κυρτά και κακώς ορισμένα, πράγμα που τις καθιστά αυτόματα ως ελκυστικές επιλογές τεχνικών βελτιστοποίησης και χρήζει την εξερεύνηση τους μεγάλης σημασίας. Στην παρούσα διπλωματική εργασία βασιστήκαμε κυρίως στην βιβλιογραφία των Nocedal και Wright [βλ. [13]], ενώ ακόμα στηριχθήκαμε σε αρκετές ακόμα βιβλιογραφίες και άρθρα όπως [βλ. [2], [10], [12], [6], [8], [7], [17], [19]].

Προτού ξεκινήσουμε την παρουσίαση των μεθόδων, θα χρειαστεί να ορίσουμε κάποιες έννοιες γραμμικής άλγεβρας και αναλύσης οι οποίες θα χρειαστούν παρακάτω.

Προαπαιτούμενες Γνώσεις

Ξεκινώντας την εργασία, παραθέτουμε βασικούς ορισμούς, οι οποίοι θα χρειαστούν στη συνέχεια της διπλωματικής. Πιο συγκεκριμένα ξεκινάμε παραθέτοντας βασικούς ορισμούς συνόλων.

1.1 Σύνολα

- Ως ανοικτή σφαίρα με κέντρο x και ακτίνα $\delta > 0$ συμβολίζουμε το σύνολο $B(x, \delta) = \{y \in \mathbb{R}^n : \|y - x\| < \delta\}$.
- Ένα σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ λέγεται ανοικτό αν $\forall x \in S$ υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε $B(x, \delta) \subseteq S$.
- Ένα σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ λέγεται κλειστό αν το συμπλήρωμα του είναι ανοικτό.
- Ένα σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ λέγεται συμπαγές αν κάθε ακολουθία στοιχείων του, περιέχει υπακολουθία που συγκλίνει σε στοιχεία του S .
- Έστω η διανυσματική νόρμα $\|\cdot\|$. Ένα σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ είναι φραγμένο, αν υπάρχει θετική σταθερά M τέτοια ώστε, $\|x\| \leq M$ για κάθε $x \in S$.
- Ένα σύνολο καλείται συμπαγές αν και μόνο αν είναι κλειστό και φραγμένο (δεν ισχύει σε χώρους άπειρης διάστασης η ισοδυναμία).

Ορισμός 1.1. Ένα υποσύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ λέγεται κυρτό, αν ισχύει

$$(1 - \alpha)x + \alpha y \in S, \quad \alpha \in [0, 1] \quad \text{για κάθε } x, y \in S.$$

Ορισμός 1.2. Η συνάρτηση $f : S \subseteq \mathbb{R}^n$ με S κυρτό, λέγεται κυρτή αν ισχύει:

$$f((1 - \alpha)x + \alpha y) \leq (1 - \alpha)f(x) + \alpha f(y), \quad \alpha \in [0, 1] \quad \text{για κάθε } x, y \in S.$$

Ορισμός 1.3. Η συνάρτηση $f : S \subseteq \mathbb{R}^n$ με S κυρτό, λέγεται αυστηρά κυρτή αν ισχύει:

$$f((1 - \alpha)x + \alpha y) < (1 - \alpha)f(x) + \alpha f(y), \quad \alpha \in [0, 1] \quad \text{για κάθε } x, y \in S \text{ με } x \neq y.$$

1.2 Νόρμες και Πίνακες

Στη συνέχεια, υπενθυμίζουμε βασικούς ορισμούς και σχετικές έννοιες με νόρμες και άλλα χαρακτηριστικά μεγέθη διανυσμάτων και πινάκων.

Ορισμός 1.4. Μια συνάρτηση με πεδίο ορισμού το \mathbb{R}^n και πεδίο τιμών το \mathbb{R}^+ λέγεται νόρμα αν ικανοποιεί τις εξής ιδιότητες:

1. $\|x\| > 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$
2. $\|x\| = 0, \quad \text{αν και μόνο αν } x = 0.$
3. $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad x \in \mathbb{R}^n.$
4. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΝΟΡΜΩΝ

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^N |x_i|$
- $\|x\|_\infty = \max_{i=1 \dots n} |x_i|$
- $\|x\|_2 = \sum_{i=1}^N (|x_i|^2)^{\frac{1}{2}}$
- Γενικά ισχύει: $\|x\|_p = \sum_{i=1}^N (|x_i|^p)^{\frac{1}{p}}$

Για την νόρμα-2 (Ευκλείδεια νόρμα), ισχύει: $\|x\|_2^2 = x^T x.$

Όλες οι νόρμες είναι ισοδύναμες σε χώρους πεπερασμένης διάστασης. Υπάρχουν δηλαδή θετικές σταθερές για τις οποίες ισχύει:

$$c\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq C\|x\|_a$$

(Δεν ισχύει σε χώρους άπειρης διάστασης).

Σημείωση: Αν μια ακολουθία στον \mathbb{R}^n συγκλίνει ως προς μια νόρμα, τότε συγκλίνει και ως προς κάθε άλλη νόρμα.

Θεώρημα 1.1. (Ανισότητα Cauchy-Schwarz)

Για κάθε διάνυσμα $x, y \in \mathbb{R}^n$ ισχύει:

$$x^T y \leq \|x\| \cdot \|y\|$$

Ορισμός 1.5. (Φυσική Νόρμα Πίνακα)

Έστω διανυσματική νόρμα $\|\cdot\|$ του \mathbb{R}^n και $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Τότε η συνάρτηση $\|\cdot\|$, που ορίζεται από ως;

$$\|A\| = \sup_{x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

είναι νόρμα και λέγεται φυσική νόρμα πίνακα, που επάγεται από τη διανυσματική νόρμα $\|\cdot\|$.

Ορισμός 1.6. Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, συμμετρικός. Ισχύουν τα παρακάτω:

- Όλες οι ιδιοτιμές του A είναι πραγματικές
- Τα διανύσματα που αντιστοιχούν στις διακριτές ιδιοτιμές, είναι ορθογώνια.
- $A = Q^T D Q$, όπου D είναι ο πίνακας με διαγώνια στοιχεία τις ιδιοτιμές του πίνακα A και Q είναι ορθογώνιος πίνακας ($Q^{-1} = Q^T$), με στήλες τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα του .

Ορισμός 1.7. Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Λέμε ότι ο A είναι:

- **Θετικά ορισμένος (Positive Definite)**, αν $x^T A x > 0$ για κάθε διάνυσμα $x \neq 0$ με $x \in \mathbb{R}^n$.
- **Θετικά ημιορισμένος (Positive Semidefinite)**, αν $x^T A x \geq 0$ για κάθε διάνυσμα $x \neq 0$ με $x \in \mathbb{R}^n$.

1.3 Στοιχεία τοπολογίας και ανάλυσης

Στην συγκεκριμένη υποενότητα παραθέτουμε τον ορισμό του διανύσματος κλίσης (βαθμίδα), καθώς και του Εσσιανού πίνακα μιας συνάρτησης f σε συνδυασμό με ορισμένα ακόμα στοιχεία τοπολογίας και ανάλυσης που θα χρειαστούν στη συνέχεια της διπλωματικής. Ξεκινάμε με τον ορισμό της κατά κατεύθυνσης παραγώγου.

Ορισμός 1.8. (Κατά κατεύθυνση παράγωγος)

Έστω $f : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, x \in S, h \in \mathbb{R}^n$. Αν $(x + \alpha h) \in S, \alpha \neq 0$ για κάθε α αρκετά μικρό και το όριο

$$\delta f(x, h) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{f(x + \alpha h) - f(x)}{\alpha} < \infty,$$

τότε το δ καλείται παράγωγος της f στο x κατά κατεύθυνση h .

Ορισμός 1.9. (Κατά θετική κατεύθυνση παράγωγος)

Έστω $f : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, x \in S, h \in \mathbb{R}^n$. Αν $(x + \alpha h) \in S, \alpha > 0$ για κάθε α αρκετά μικρό και το όριο

$$\delta_+ f(x, h) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{f(x + \alpha h) - f(x)}{\alpha} < \infty,$$

τότε το δ_+ καλείται παράγωγος της f στο x κατά θετική κατεύθυνση h .

Ορισμός 1.10. Έστω $\Omega \in \mathbb{R}^n$ ανοιχτό και f συνεχώς παραγωγίσιμη συνάρτηση. Τότε για οποιοδήποτε διάνυσμα $x_k \in \mathbb{R}^n$, το διάνυσμα κλίσης της f στο x_k που συμβολίζεται με $\nabla f(x_k)$ γράφεται ως:

$$\nabla f(x_k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Ορισμός 1.11. Για την διανυσματική συνάρτηση $r : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, ορίζεται ο Ιακωβιανός πίνακας J , για την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης ως εξής:

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} & \frac{\partial r_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial r_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial r_2}{\partial x_1} & \frac{\partial r_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial r_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial r_n}{\partial x_1} & \frac{\partial r_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial r_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Ορισμός 1.12. Έστω $\Omega \in \mathbb{R}^n$ ανοιχτό και η f είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη συνάρτηση. Τότε για οποιοδήποτε διάνυσμα $x_k \in \mathbb{R}^n$, ο εσσιανός πίνακας της f

στο x_k που συμβολίζεται με $\nabla^2 f(x_k)$, γράφεται ως:

$$\nabla^2 f(x_k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}.$$

Θεώρημα 1.2. (Θεώρημα Taylor)

Υποθέτουμε ότι $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς παραγωγίσιμη και $p \in \mathbb{R}^n$. Τότε έχουμε ότι:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p,$$

για κάποιο $t \in (0,1)$. Επιπλέον, αν η f είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη, έχουμε ότι:

$$\nabla f(x+p) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp)^T p dt$$

και τελικά έχουμε:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p \quad \text{για κάποιο } t \in (0,1).$$

Ορισμός 1.13. Έστω μια διανυσματική συνάρτηση $f : S \rightarrow \mathbb{R}^n$, $S \subseteq \mathbb{R}^n$. Αν υπάρχει σταθερά L τέτοια ώστε να ισχύει:

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L \|x - y\|,$$

για όλα τα $x, y \in \mathbb{R}^n$, τότε η f λέγεται συνάρτηση Lipschitz ή συνάρτηση που ικανοποιεί μια συνθήκη Lipschitz στο σύνολο S , ενώ η σταθερά L ονομάζεται σταθερά Lipschitz.

Θεώρημα 1.3. (Θεώρημα Μέσης Τιμής)

Έστω μια συνεχώς παραγωγίσιμη συνάρτηση $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ και δύο πραγματικοί αριθμοί α_0, α_1 για τους οποίους ισχύει $\alpha_1 > \alpha_0$, τότε ισχύει ότι:

$$\phi(\alpha_1) = \phi(\alpha_0) + \phi'(\xi)(\alpha_1 - \alpha_0),$$

για κάποιο $\xi \in (0,1)$. Μια επέκταση αυτού του θεωρήματος για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι η εξής:

Για κάθε διάνυσμα p , έχουμε ότι:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p,$$

για κάποιο $t \in (0,1)$.

Η επέκταση των παραπάνω θεωρημάτων για διανυσματική συνάρτηση $r : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ για $m > 1$ δεν είναι άμεση. Το παρακάτω αποτέλεσμα χρησιμοποιείται συχνά ως αναλογία και θα δουλέψουμε για την περίπτωση όπου $m = n$. Έχουμε ορίσει τον ιακωβιανό πίνακα της διανυσματικής συνάρτησης $r(x)$ (ορισμός 1.1) με $J(x)$ όπου

J , είναι $n \times n$ πίνακας και το (i, j) στοιχείο του είναι $\frac{\partial r_i}{\partial x_j}$ με $i = 1, 2, \dots, n$ και $j = 1, 2, \dots, n$. Υποθέτουμε ότι ο J είναι συνεχής και καλώς ορισμένος στο πεδίο ορισμού που εργαζόμαστε, για δοσμένο x, p , έχουμε:

$$r(x+p) - r(x) = \int_0^1 J(x+tp)p dt.$$

Για αρκετά μικρό p σε νόρμα, μπορούμε να γράψουμε προσεγγιστικά το δεξί μας μέλος ίσο με $J(x)p$, και έτσι έχουμε:

$$r(x+p) - r(x) \approx J(x)p.$$

Εάν τώρα ο J είναι συνεχής συνάρτηση απο: $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ με σταθερά Lipschitz L στο διάστημα $(x, x+p)$, το σφάλμα της παραπάνω προσέγγισης υπολογίζεται απο την:

$$\begin{aligned} \|r(x+p) - r(x) - J(x)p\| &= \left\| \int_0^1 [J(x+tp) - J(x)]p dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|J(x+tp) - J(x)\| \cdot \|p\| dt \\ &\leq \int_0^1 Lt\|p\|^2 dt = \frac{1}{2}L\|p\|^2. \end{aligned}$$

1.3.1 Ακρότατα

Στην παρακάτω υποενότητα, συνοψίζονται οι βασικοί ορισμοί ακροτάτων καθώς και ύπαρξης αυτών.

Ορισμός 1.14. Έστω συνάρτηση $f : S \subset \mathbb{R}^n$. Το \bar{x} , λέγεται σημείο ολικού ελαχίστου της f στο S αν ισχύει $f(\bar{x}) \leq f(x)$ για κάθε $x \in S$.

Ορισμός 1.15. Έστω συνάρτηση $f : S \subset \mathbb{R}^n$. Το \bar{x} , λέγεται σημείο τοπικού ελαχίστου της f στο S υπάρχει $\delta > 0$, τέτοιο ώστε για κάθε $x \in B(\bar{x}, \delta) \cap S$, να ισχύει $f(\bar{x}) \leq f(x)$.

Ορισμός 1.16. Έστω συνάρτηση $f : S \subset \mathbb{R}^n$. Το \bar{x} , λέγεται σημείο ολικού μεγίστου της f στο S αν ισχύει $f(\bar{x}) \geq f(x)$ για κάθε $x \in S$.

Ορισμός 1.17. Έστω συνάρτηση $f : S \subset \mathbb{R}^n$. Το \bar{x} , λέγεται σημείο τοπικού μεγίστου της f στο S υπάρχει $\delta > 0$, τέτοιο ώστε για κάθε $x \in B(\bar{x}, \delta) \cap S$, να ισχύει $f(\bar{x}) \geq f(x)$.

Σημείωση: Ένα σημείο \bar{x} είναι σημείο ολικού μεγίστου της f , αν και μόνο αν είναι σημείο ολικού ελαχίστου της $-f$.

Θεώρημα 1.4. Έστω συνεχής συνάρτηση $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ και $S \subset \mathbb{R}^n$, μη κενό και συμπαγές σύνολο. Τότε η f , έχει τουλάχιστον ένα σημείο ελαχίστου στο S .

Θεώρημα 1.5. Έστω συνάρτηση $f : S \rightarrow \mathbb{R}$, κυρτή με S κυρτό. Τότε το $x \in S$ είναι σημείο ολικού ελαχίστου της f στο S , αν και μόνο αν είναι σημείο τοπικού ελαχίστου της f στο S .

Θεώρημα 1.6. Έστω συνάρτηση $f : S \rightarrow \mathbb{R}$, αυστηρά κυρτή με S κυρτό. Τότε η f έχει το πολύ ένα σημείο ελαχίστου.

1.4 Ποσοστά Σύγκλισης

ΓΙΑ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ

- Έστω x_k μια ακολουθία του \mathbb{R}^n , η οποία συγκλίνει στο \bar{x} . Η σύγκλιση καλείται Q-γραμμική (Q-linear), αν υπάρχει σταθερά $r \in (0, 1)$ και υπάρχει $k_0 \in \mathbb{N}$, τέτοια ώστε να ισχύει:

$$\frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} \leq r \quad \text{για κάθε } k \geq k_0.$$

Η απόσταση δηλαδή από την λύση \bar{x} , μειώνεται σε κάθε επανάληψη κατά τουλάχιστον μια σταθερά φραγμένη από το 1. Η συντομογραφία Q, προκύπτει από τον όρο Quotient (πηλίκο), διότι ορίζεται από το πηλίκο των διαδοχικών σφαλμάτων.

- Η σύγκλιση λέγεται Q-υπεργραμμική (Q-superlinear), αν η ακολουθία συγκλίνει, δηλαδή $x_k \rightarrow x$ και ισχύει:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} = 0.$$

- Η σύγκλιση λέγεται Q-τετραγωνική (Q-quadratic), αν η ακολουθία συγκλίνει, δηλαδή $x_k \rightarrow x$ και υπάρχει $M > 0$ και $k_0 \in \mathbb{N}$ τέτοια ώστε να ισχύει:

$$\frac{\|x_{k+1} - \bar{x}\|}{\|x_k - \bar{x}\|} \leq M \quad \text{για κάθε } k \geq k_0,$$

όπου M θετική σταθερά, όχι απαραίτητα μικρότερη του 1. Η τετραγωνική σύγκλιση επιτυγχάνεται με πιο γρήγορο ρυθμό από τις γραμμικές συγκλίσεις.

Σημείωση: Οποιαδήποτε ακολουθία συγκλίνει τετραγωνικά, συγκλίνει και υπεργραμμικά, ενώ οποιαδήποτε ακολουθία συγκλίνει υπεργραμμικά, συγκλίνει και γραμμικά.

Προβλήματα Βελτιστοποίησης

2.1 Το γενικό πρόβλημα Βελτιστοποίησης

Με τον όρο βελτιστοποίηση στο πεδίο των μαθηματικών, στοχεύουμε στην ελαχιστοποίηση (αντίστοιχα μεγιστοποίηση) μιας συνάρτησης που υπόκειται σε περιορισμούς ως προς τις μεταβλητές της. Το πρώτο βήμα στην διαδικασία επίλυσης ενός προβλήματος βελτιστοποίησης είναι η μαθηματική μοντελοποίηση.

2.1.1 Μαθηματική Μοντελοποίηση

Χρησιμοποιούμε τους εξής συμβολισμούς:

- x είναι το διάνυσμα των μεταβλητών/παραμέτρων. (variables)
- f είναι η αντικειμενική συνάρτηση που καλούμαστε να ελαχιστοποιήσουμε (μεγιστοποιήσουμε αντίστοιχα). (objective function)
- c_i είναι οι εξισώσεις των περιορισμών, οι οποίες είναι βαθμωτές συναρτήσεις του x και ορίζουν συγκεκριμένες ισότητες ή ανισότητες που πρέπει να ικανοποιεί το διάνυσμα x . (constraints)

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης ορίζεται παρακάτω:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (2.1)$$

υπό τους περιορισμούς:

$$\begin{aligned} c_i(x) &= 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) &\geq 0 & i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

Όπου τα σύνολα \mathcal{E}, \mathcal{I} αναπαριστούν τα σύνολα δεικτών των περιορισμών ισότητας και ανισότητας αντίστοιχα.

2.1.2 Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης είναι επαναληπτικοί. Ξεκινάνε απο ένα αρχικό σημείο x_0 και παράγουν μια ακολουθία βελτιωμένων εκτιμήσεων έως ότου καταλήξουν στην λύση. Οι πληροφορίες που χρησιμοποιούν οι αλγόριθμοι είναι συνήθως, οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης, οι εξισώσεις των περιορισμών ή και πληροφορία των παραγώγων της συνάρτησης. Σε ορισμένους αλγόριθμους, αντλείται πληροφορία και απο τις προηγούμενες επαναλήψεις, ενώ άλλοι βασίζονται μόνο στην τοπική πληροφορία της τρέχουσας επανάληψης. Για να ορίσουμε έναν αποδοτικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης βασιζόμαστε στα παρακάτω:

- Ευρωστία (Robustness): Να αποδίδουν ικανοποιητικά σε μεγάλο εύρος προβλημάτων της τάξης τους, για λογική επιλογή αρχικού σημείου. Εδώ επισημαίνεται πως η επιλογή κατάλληλης αρχικής συνθήκης δεν είναι πάντα προφανής.
- Αποδοτικότητα (Efficiency): Να μην απαιτούν απαγορευτικούς υπολογιστικούς πόρους (χρόνο και χώρο).
- Ακρίβεια (Accuracy): Θα πρέπει να είναι ακριβείς ως προς τον εντοπισμό της πιθανής λύσης, χωρίς να είναι υπερ ευαίσθητοι στα σφάλματα των δεδομένων ή σφάλματα στρογγυλοποίησης, που προκύπτουν όταν εφαρμοστούν σε υπολογιστικό περιβάλλον.

2.2 Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

Στα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, σκοπός μας είναι να ελαχιστοποιήσουμε την αντικειμενική συνάρτηση πραγματικών μεταβλητών, οι οποίες δεν υπόκεινται σε περιορισμούς στις τιμές που δύνανται να λάβουν. Η μαθηματική διατύπωση που χρησιμοποιούμε είναι:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x),$$

όπου $x \in \mathbb{R}^n$ διάνυσμα πραγματικών αριθμών με $n \geq 1$ στοιχεία και $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Το κύριο πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε είναι ότι δεν έχουμε συνολική εικόνα για την συνάρτηση f . Συνήθως γνωρίζουμε τις τιμές που λαμβάνει καθώς και μερικές απο τις παραγώγους της σε ένα σύνολο σημείων. Επομένως οι αλγόριθμοι πρέπει να κατασκευαστούν, βασιζόμενοι στις διαθέσιμες πληροφορίες. Οι επιπλέον πληροφορίες για την αντικειμενική συνάρτηση μπορεί να κριθούν ιδιαίτερα κοστοβόρες υπολογιστικά και για αυτό τον λόγο αποφεύγουμε αλγόριθμους οι οποίοι αντλούν πολλές απο αυτές τις πληροφορίες άσκοπα.

2.2.1 Λύση του προβλήματος Βελτιστοποίησης

Επαναφέρουμε τους ορισμούς ακροτάτων που ορίστηκαν στο 1^ο κεφάλαιο και παραθέτουμε δύο νέους ορισμούς που θα ενισχύσουν την εύρεση λύσης του προβλήματος.

Σημείωση: Ως γειτονιά του x ορίζουμε ένα ανοικτό σύνολο το οποίο περιέχει το x . Για παράδειγμα η ανοικτή σφαίρα $B(x, \delta)$ για $\delta > 0$, ορίζει γειτονιά του x .

Ορισμός 2.1. Ένα σημείο x^* καλείται *αυστηρά τοπικό ελάχιστο*, αν υπάρχει γειτονιά N του x^* τέτοια ώστε $f(x^*) < f(x)$ για κάθε $x \in N$, με $x \neq x^*$.

Ορισμός 2.2. Ένα σημείο x^* καλείται *απομονωμένο τοπικό ελάχιστο*, αν υπάρχει γειτονιά N του x^* τέτοια ώστε το x^* να είναι μοναδικό τοπικό ελάχιστο στην γειτονιά αυτή.

Θεώρημα 2.1 (Πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες). [βλ. [13], theorem 2.1] Αν το x^* είναι τοπικό ελάχιστο και η f είναι συνεχώς παραγωγίσιμη σε μια ανοικτή γειτονιά του x^* , τότε:

$$\nabla f(x^*) = 0.$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Υποθέτουμε ότι $\nabla f(x^*) \neq 0$. Θεωρούμε το διάνυσμα $p = -\nabla f(x^*)$ και σημειώνουμε ότι $p^T \nabla f(x^*) = -\|\nabla f(x^*)\|^2 < 0$. Επειδή η f είναι συνεχής γύρω από το x^* , υπάρχει σταθερά $T > 0$ τέτοια ώστε:

$$p^T \nabla f(x^* + tp) < 0, \quad \text{για όλα τα } t \in [0, T] \quad (2.2)$$

Για οποιοδήποτε $\bar{t} \in [0, T]$, έχουμε από το θεώρημα Taylor ότι:

$$f(x^* + \bar{t}p) = f(x^*) + \bar{t}p^T \nabla f(x^* + \bar{t}p), \quad \text{για κάποιο } t \in (0, \bar{t}) \quad (2.3)$$

Επομένως $f(x^* + \bar{t}p) < f(x^*)$ για κάθε $\bar{t} \in [0, T]$. Έχουμε βρει μία κατεύθυνση που απομακρύνεται από το x^* ενώ παράλληλα η f φθίνει, συνεπώς το x^* δεν είναι σημείο ελαχίστου, άτοπο. □

Θεώρημα 2.2 (Δεύτερης τάξης αναγκαίες συνθήκες). [βλ. [13], theorem 2.3] Αν το x^* είναι τοπικό ελάχιστο της f και επιπλέον ο εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f$ υπάρχει και είναι συνεχής σε μια ανοικτή γειτονιά του x^* , τότε $\nabla f(x^*) = 0$ και ο $\nabla^2 f$ είναι θετικά ημιορισμένος.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Γνωρίζουμε από το θεώρημα (2.1), ότι $\nabla f(x^*) = 0$ αν το x^* είναι σημείο τοπικού ελαχίστου και υποθέτουμε ότι ο $\nabla^2 f$ δεν είναι θετικά ημιορισμένος. Τότε μπορούμε να επιλέξουμε ένα διάνυσμα $p \neq 0$ τέτοιο ώστε $p^T \nabla^2 f(x^*) p < 0$ και επειδή η f είναι συνεχής γύρω από το x^* υπάρχει σταθερά $T > 0$ τέτοια ώστε:

$$p^T \nabla^2 f(x^* + tp) p < 0, \quad \text{για όλα τα } t \in [0, T]. \quad (2.4)$$

Με τη χρήση του Θεωρήματος Taylor γύρω από το x^* έχουμε για όλα τα $\bar{t} \in [0, T]$ και για κάποιο $t \in (0, \bar{t})$ ότι:

$$f(x^* + \bar{t}p) = f(x^*) + \bar{t}p^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} \bar{t}^2 p^T \nabla^2 f(x^* + \bar{t}p) p < f(x^*), \quad (2.5)$$

χρησιμοποιώντας την (2.4) και την πληροφορία ότι $\nabla f(x^*) = 0$, ακριβώς όπως και στο θεώρημα (2.1), έχουμε βρεί μια κατεύθυνση που απομακρύνεται από το x^* και η f φθίνει, επομένως το x^* δεν αναπαριστά σημείο τοπικού ελαχίστου, άτοπο.

□

Θεώρημα 2.3 (Δεύτερης τάξης ικανές συνθήκες). [βλ. [13], theorem 2.4] Υποθέτουμε ότι ο εσσιανός $\nabla^2 f$ είναι συνεχής σε μια ανοικτή γειτονιά του x^* και ότι $\nabla f(x^*) = 0$, ενώ $\nabla^2 f$ είναι θετικά ορισμένος. Τότε το x^* είναι αυστηρά τοπικό ελάχιστο της f .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Επειδή $\nabla^2 f$ συνεχής, μπορούμε να επιλέξουμε μια ακτίνα $r > 0$ τέτοια ώστε ο $\nabla^2 f(x^*)$ να παραμένει θετικά ορισμένος για κάθε x στην ανοικτή μπάλα

$$D = \{z \mid \|z - x^*\| < r\}.$$

Επιλέγοντας οποιοδήποτε διάνυσμα $p \neq 0$ με $\|p\| < r$ έχουμε $(x^* + p) \in D$ και έτσι απο το θεώρημα Taylor έχουμε:

$$\begin{aligned} f(x^* + p) &= f(x^*) + p^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(z) p \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(z) p, \end{aligned} \quad (2.6)$$

όπου $z = x^* + tp$ για κάποιο $t \in (0, 1)$. Εφόσον $z \in D$, έχουμε ότι $p^T \nabla^2 f(z) p < 0$ και επομένως

$$f(x^* + p) > f(x^*),$$

που μας δίνει το ζητούμενο αποτέλεσμα.

□

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΗ: Οι δεύτερης τάξης ικανές συνθήκες του θεωρήματος (2.3), εγγυώνται κάτι πιο ισχυρό απο τις αναγκαίες, συγκεκριμένα ότι το σημείο ελαχίστου είναι αυστηρά σημείο τοπικού ελαχίστου. Οι ικανές συνθήκες δεν είναι απαραίτητα και αναγκαίες. Ένα σημείο x^* μπορεί να είναι σημείο τοπικού ελαχίστου και να μην πληροί τις ικανές συνθήκες.

Θεώρημα 2.4 (βλ. [13], Theorem 2.5). Όταν η f είναι κυρτή, κάθε σημείο τοπικού ελαχίστου είναι και σημείο ολικού ελαχίστου. Αν επιπλέον η f είναι παραγωγίσιμη, τότε οποιοδήποτε στάσιμο σημείο x^* της f , είναι σημείο ολικού ελαχίστου.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Υποθέτουμε ότι το x^* είναι σημείο τοπικού ελαχίστου, αλλά όχι ολικού. Τότε μπορούμε να βρούμε ένα σημείο $z \in \mathbb{R}^n$, με $f(z) < f(x^*)$. Θεωρούμε το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει το σημείο x^* με το z , με εξίσωση:

$$x = \lambda z + (1 - \lambda)x^*, \quad \text{για κάποιο } \lambda \in (0, 1]. \quad (2.7)$$

Απο τις ιδιότητες κυρτότητας έχουμε:

$$f(x) < \lambda f(z) + (1 - \lambda)f(x^*) < f(x^*). \quad (2.8)$$

Κάθε γειτονιά του x^* περιέχει ένα κομμάτι του παραπάνω ευθύγραμμου τμήματος, συνεπώς θα υπάρχει πάντα ένα σημείο $x \in N$, το οποίο ικανοποιεί τη συνθήκη

(2.8). Επομένως το x^* δεν αναπαριστά σημείο τοπικού ελαχίστου, άτοπο. Για το δεύτερο κομμάτι του θεωρήματος, υποθέτουμε ότι το x^* δεν είναι ολικό ελάχιστο και επιλέγουμε το z όπως προηγουμένως. Τότε λόγω κυρτότητας έχουμε:

$$\begin{aligned}\nabla f(x^*)^T(z - x^*) &= \frac{d}{d\lambda} f(x^* + \lambda(z - x^*))|_{\lambda=0} \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{f(x^* + \lambda(z - x^*)) - f(x^*)}{\lambda} \\ &\leq \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\lambda f(z) + (1 - \lambda)f(x^*) - f(x^*)}{\lambda} \\ &= f(z) - f(x^*) < 0.\end{aligned}$$

Συνεπώς $\nabla f(x^*) \neq 0$, άρα το x δεν είναι στάσιμο σημείο. □

2.3 Line Search Methods

Όλες οι μέθοδοι που θα παρουσιαστούν σε αυτή την εργασία είναι επαναληπτικές, παράγουν δηλαδή μια σειρά απο διανύσματα x_0, x_1, x_2, \dots , που στις περισσότερες περιπτώσεις συγκλίνουν υπό ορισμένες συνθήκες. Θέλουμε η ακολουθία $\{x_k\}$ των διανυσμάτων που παράγεται να συγκλίνει σε ένα σημείο x^* , το οποίο είναι τοπικό ελάχιστο της αντικειμενικής συνάρτησης σύμφωνα με τον ορισμό που παρουσιάσαμε.

Στα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς οι τεχνικές Line Search είναι μια απο τις δύο θεμελιώδεις τεχνικές που εφαρμόζονται. Με την χρήση τεχνικών Line Search, ουσιαστικά αναζητούμε το ελάχιστο της συνάρτησης πάνω στην τρέχουσα γραμμή αναζήτησης, η οποία καθορίζεται απο το διάνυσμα καθόδου και συνήθως καλείται κατεύθυνση καθόδου και επαναλαμβάνουμε την διαδικασία αυτή έως ότου φτάσουμε στο επιθυμητό αποτέλεσμα ή έως ότου ο αλγόριθμος δεν παράγει ικανοποιητική μείωση. Η διαδικασία εύρεσης του ελαχίστου της εκάστοτε κατεύθυνσης είναι και η πιο χρονοβόρα διαδικασία των τεχνικών Line Search όπως θα δούμε παρακάτω.

Σημείωση: Παρακάτω σε πολλές περιπτώσεις θα χρησιμοποιήσουμε τους συμβολισμούς: $f_k = f(x_k)$, $\nabla f_k = \nabla f(x_k)$.

Θα χρειαστεί να ορίσουμε μερικές έννοιες, όπως αυτή της κατεύθυνσης καθόδου (descent direction) η οποία σύμφωνα με τα παραπάνω αποτρέπει την σύγκλιση σε σημείο μέγιστου και μειώνει την πιθανότητα σύγκλισης σε σαγματικό σημείο.

Ορισμός 2.3 (βλ. [12], section 4, (4,1)). Έστω η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και ένα σημείο x_k της f . Ως κατεύθυνση καθόδου (descent direction), ονομάζεται ένα διάνυσμα $p_k \in \mathbb{R}^n$ της f στο x_k αν υπάρχει $\delta > 0$, τέτοιο ώστε:

$$f(x_k + tp_k) < f(x_k) \quad \forall t \in (0, \delta). \quad (2.9)$$

Θεώρημα 2.5 (βλ. [12], section 4, (4.2)). Έστω η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και $\nabla f(x_k)$ η κλίση της f στο x_k . Αν ισχύει $\nabla f(x_k)^T p_k < 0$ τότε το διάνυσμα p_k είναι κατεύθυνση καθόδου της f .

Ορισμός 2.4 (Steepest Descent Direction). (βλ [12], section 4, (4.2)) Έστω η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και $\nabla f(x_k)$ η κλίση της f στο x_k με $\nabla f(x_k) \neq 0$. Τότε το διάνυσμα $p_k = -\nabla f(x_k)$ καλείται ως η πιο απότομη κατεύθυνση καθόδου (steepest descent direction) της f στο x_k .

Για παράδειγμα η κατεύθυνση $-\nabla f(x_k)$, είναι μια κατεύθυνση καθόδου.

2.3.1 Η γενική ιδέα της μεθόδου Line Search

Κάθε επανάληψη της μεθόδου line search επιλέγει μια κατεύθυνση p_k και πόσο μακριά θα κινηθεί σε αυτή. Η επαναληπτική μέθοδος γράφεται ως εξής:

$$x_{k+1} = x_k + a_k p_k, \quad (2.10)$$

ο όρος $a_k p_k$, καλείται όρος διόρθωσης και η θετική σταθερά a_k καλείται μήκος βήματος (step length). Συνήθως απαιτείται το διάνυσμα p_k να είναι κατεύθυνση καθόδου και να επιφέρει επαρκή μείωση της συνάρτησης δηλαδή $f(x_k + a_k p_k) \leq f(x_k)$. Όσον αφορά το μήκος βήματος ο αλγόριθμος στοχεύει να λύσει το πρόβλημα ελαχιστοποίησης:

$$\min \phi(a) = f(x_k + a p_k). \quad (2.11)$$

Για να θεωρηθεί ότι ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε με τεχνικές Line Search είναι αποδοτικός θα πρέπει να επιτευχθεί συνδυασμός αποτελεσματικής επιλογής τόσο της κατεύθυνσης, όσο και του μήκους βήματος.

Σημείωση: Η ακριβής επίλυση της (2.11), δεν είναι εφικτή και ακόμα όταν είναι εφικτή, είναι υπολογιστικά ακριβής.

ΣΥΝΘΗΚΕΣ WOLFE

Μια δημοφιλής τεχνική τερματισμού του αλγόριθμου αναζήτησης του μήκους βήματος είναι η χρήση των συνθηκών Wolfe [13]. Με την ικανοποίηση των συνθηκών Wolfe το μήκος βήματος δίνει επαρκή μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης και αποκλείει μη αποδεκτές τιμές του α .

$$f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k, \quad (\text{Armijo Condition}) \quad (2.12)$$

$$\nabla f(x_k + \alpha p_k)^T p_k \leq c_2 \nabla f_k^T p_k. \quad (2.13)$$

Η συνθήκη Armijo [εξ. (2.12)] εξασφαλίζει ότι το επιλεγμένο α θα δώσει επαρκή μείωση στην αντικειμενική συνάρτηση για μια σταθερά $c_1 \in (0, 1)$. Με άλλα λόγια απο την εξίσωση (2.12) παρατηρούμε ότι η μείωση της f πρέπει να είναι ανάλογη του μήκους βήματος α και της παραγώγου κατεύθυνσης $\nabla f(x_k)^T p_k$.

Η επαρκής μείωση πολλές φορές δεν είναι αρκετή ώστε ο αλγόριθμος να προοδεύει ουσιαστικά. Στόχος μας τώρα είναι να αποκλείσουμε τις πολύ μικρές τιμές του

α οι οποίες ικανοποιούν την παραπάνω εξίσωση. Κάτι τέτοιο επιτυγχάνεται με την χρήση της εξίσωσης (2.13) η οποία καλείται και ως συνθήκη καμπυλότητας για μια σταθερά $c_2 \in (c_1, 1)$. Ο συνδυασμός των εξισώσεων (2.12),(2.13) αποτελούν τις συνθήκες Wolfe. Ένα πρόβλημα που μπορεί να προκύψει με την χρήση των απλών συνθηκών Wolfe, είναι ότι μια επιλογή μήκους βήματος α ενδέχεται να ικανοποιεί τις συνθήκες, χωρίς απαραίτητα να βρίσκεται κοντά στο σημείο ελαχίστου για την συνάρτηση ϕ . Το συγκεκριμένο πρόβλημα αντιμετωπίζουμε ενισχύοντας τις απλές συνθήκες Wolfe αναγκάζοντας τις συνθήκες καμπυλότητας να περιορίζουν το μήκος βήματος σε μια γειτονιά κοντά στο σημείο ελαχίστου της συνάρτησης ϕ . Οι νέες συνθήκες καλούνται ισχυρές συνθήκες Wolfe και γράφονται παρακάτω:

$$f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha \nabla f_k^T p_k \quad (\text{Armijo Condition}) \quad (2.14)$$

$$|\nabla f(x_k + \alpha p_k)^T p_k| \leq c_2 |\nabla f_k^T p_k|. \quad (2.15)$$

Η ουσιαστική διαφορά βρίσκεται στο γεγονός ότι αποκλείουμε το ενδεχόμενο να καταλήξουμε σε σαγματικά σημεία, μη επιτρέποντας στην συνάρτηση $\phi(\alpha)$ να λάβει αρκετά μεγάλη θετική τιμή.

Παρακάτω παραθέτουμε και ένα λήμμα και την απόδειξη του, βασισμένοι στο [13], το οποίο αναφέρει ότι για κάθε ομαλή συνάρτηση f και κάτω φραγμένη, υπάρχουν βήματα α τερματισμού, τα οποία ικανοποιούν τις απλές αλλά και τις ισχυρές συνθήκες Wolfe.

Λήμμα 1 (βλ [13], lemma 3.1). Υποθέτουμε ότι η $f : R^n \rightarrow R$ είναι συνεχώς παραγωγίσιμη. Για p_k κατεύθυνση καθόδου στο x_k και υποθέτοντας ότι η f είναι κάτω φραγμένη κατά μήκος της ακτίνας $\{x_k + \alpha p_k | \alpha > 0\}$. Τότε για σταθερές c_1, c_2 με $0 < c_1 < c_2 < 1$ υπάρχουν διαστήματα βημάτων α τα οποία ικανοποιούν τις συνθήκες Wolfe.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Σημειώνουμε ότι η συνάρτηση $\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$ είναι κάτω φραγμένη για όλα τα $\alpha > 0$, όπως υποδεικνύουν οι υποθέσεις του θεωρήματος. Εφόσον $0 < c_1 < 1$, η γραμμή $l(\alpha) = f(x_k) + \alpha c_1 \nabla f_k^T p_k$ δεν φράσσεται απο κάτω και έτσι πρέπει να τέμνει το γράφημα της ϕ σε τουλάχιστον ένα σημείο. Υποθέτουμε ότι η τιμή α' είναι η τιμή για την οποία η γραμμή τέμνει την συνάρτηση, έχουμε:

$$l(\alpha') = f(x_k + \alpha' p_k) = f(x_k) + \alpha' c_1 \nabla f_k^T p_k,$$

που σημαίνει ότι συνθήκη επαρκούς μείωσης (2.12) ισχύει για όλα τα βήματα μικρότερα του α' . Απο το θεώρημα μέσης τιμής, υπάρχει $\alpha'' \in (0, \alpha')$, τέτοιο ώστε:

$$f(x_k + \alpha' p_k) - f(x_k) = \alpha' \nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^T p_k.$$

Συνδυάζοντας τις δύο παραπάνω εξισώσεις παίρνουμε:

$$\nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^T p_k = c_1 \nabla f_k^T p_k > c_2 \nabla f_k^T p_k,$$

αφού $c_1 < c_2$ και $\nabla f_k^T p_k < 0$. Επομένως το α'' ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe και οι ανισότητες (2.12),(2.13) ισχύουν. Έτσι απο την υπόθεση ότι η f είναι ομαλή, υπάρχει ένα διάστημα στο οποίο γύρω απο το α'' , ικανοποιούνται οι συνθήκες Wolfe και αφού

$$\nabla f(x_k + \alpha'' p_k)^T p_k < 0,$$

ικανοποιούνται και οι ισχυρές συνθήκες Wolfe στο ίδιο διάστημα. □

Οι συνθήκες Wolfe είναι επίσης αμετάβλητες ως προς την κλίμακα, δηλαδή δεν επηρεάζονται από μια πιθανή αλλαγή της συνάρτησης πολλαπλασιασμένη από μια σταθερά ή από μικρές αλλαγές, πράγμα που τις κάνει ιδιαίτερα εύχρηστες.

Εδώ θα παρουσιάσουμε έναν αλγόριθμο Line Search με τεχνικές Backtracking [13], ο οποίος ενώ χρησιμοποιεί την συνθήκη επαρκούς μείωσης, μπορεί να απαλλαχθεί από την συνθήκη καμπυλότητας για λογικές επιλογές μήκους βήματος.

Algorithm 1 Backtracking Line search

Επιλέξτε $\alpha_0 > 0$, $\rho \in (0, 1)$, $c \in (0, 1)$; Set $\alpha \leftarrow \alpha_0$;

repeat

until $f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + c\alpha \nabla f_k^T p_k$

$\alpha \leftarrow \rho\alpha$;

Τερματισμός με $\alpha_k = \alpha$

2.3.2 Η μέθοδος Steepest Descent

Η πιο απλή μορφή κατεύθυνσης καθόδου που ήδη ορίσαμε παραπάνω είναι αυτή της απότομης καθόδου (Steepest Descent). Κάνοντας χρήση του θεωρήματος Taylor πρώτης τάξης για τη συνάρτηση f έχουμε

$$f(x_k + p) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p, \quad (2.16)$$

όπου το $\|p\|$ είναι αρκετά μικρό. Για αξιόπιστη προσέγγιση της f , θέλουμε ο όρος $\nabla f(x_k)^T p$ να είναι όσο δυνατόν μικρότερος. Έτσι επιλέγουμε να κανονικοποιήσουμε το p , δηλαδή $\|p\| = 1$, έχοντας τότε ως την μικρότερη δυνατή τιμή του γινομένου $\nabla f(x_k)^T p$, να προκύπτει για κατεύθυνση

$$p = -\frac{\nabla f_k}{\|\nabla f_k\|}.$$

Συμβολίζουμε $\nabla f(x_k) = \nabla f_k$. Προφανώς για να είναι κατεύθυνση καθόδου, πρέπει η ποσότητα $\nabla f(x_k)$, να είναι διάφορη του μηδενός. Έτσι έχοντας ως επιλεγμένη κατεύθυνση καθόδου αυτή της Steepest Descent και εκτελώντας τεχνικές Line Search, μπορούμε να έχουμε έναν αξιόπιστο αλγόριθμο βελτιστοποίησης. Όσον αφορά τη σύγκλιση αποδεικνύεται (βλ.[2]) ότι η μέθοδοι με χρήση της κατεύθυνσης Steepest Descent παρέχουν γραμμική σύγκλιση για τετραγωνικές συνάρτησεις. Γενικά σύμφωνα με το [2] η σύγκλιση που παρέχει η μέθοδος Steepest Descent είναι γραμμική και η διαφορά $f(x_k) - f(x^*)$, τείνει στο μηδέν όπως μια γεωμετρική σειρά, ενώ μπορεί σε πολλές περιπτώσεις να γίνει πολύ αργή, ακόμα και για προβλήματα καλής κλίμακας.

2.3.3 Η μέθοδος Newton

Μία ακόμα κατεύθυνση καθόδου που θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα, καθώς έχει την δυνατότητα να οδηγήσει σε τετραγωνική σύγκλιση, είναι η κατεύθυνση Newton (Newton's direction). Κάνοντας χρήση του θεωρήματος Taylor δεύτερης τάξης για τη συνάρτηση $f(x_k + p)$ έχουμε:

$$f(x_k + p) \approx f(x_k) + p^T \nabla f(x_k) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x_k) p. \quad (2.17)$$

Υποθέτουμε ότι ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(x_k)$ είναι θετικά ορισμένος και ελαχιστοποιώντας την παραπάνω προσεγγιστική συνάρτηση, παραγωγίζοντας ως προς την μεταβλητή p προκύπτει ότι:

$$p_k^N = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k, \quad \text{Κατεύθυνση καθόδου Newton.} \quad (2.18)$$

Για επιλογή αρχικού σημείου x_0 , που βρίσκεται κοντά στο ελάχιστο της συνάρτησης και για εσσιανό πίνακα nonsingular, δηλαδή θετικά ορισμένο, η σύγκλιση είναι Q-τετραγωνική [16] [13] και άρα η εύρεση του ολικού ελαχίστου μέσω του αλγόριθμου της μεθόδου Newton γίνεται ταχεία και αποτελεσματικά, ενώ επιπλέον η μέθοδος Newton για προβλήματα βελτιστοποίησης είναι ανθετική και δεν είναι ευαίσθητη σε αλλαγή συντεταγμένων ή μικρές μεταβολές των συντεταγμένων. [2] Η αρνητική πλευρά της μεθόδου, είναι ότι απαιτείται υπολογισμός των παραγώγων ∇f και $\nabla^2 f$. Στα περισσότερα προβλήματα και κυρίως σε προβλήματα χαμηλής διάστασης ο υπολογισμός των παραγώγων είναι εφικτός και χωρίς μεγάλο υπολογιστικό κόστος, ωστόσο για προβλήματα μεγάλης κλίμακας, μπορεί να κριθεί ιδιαίτερα δύσκολος. Το συγκεκριμένο πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί μέσω πεπερασμένης παραγωγίσης (finite differencing), κατά την οποία γίνεται υπολογισμός παραγώγου μέσω αριθμητικών επαναληπτικών τεχνικών ή μέσω μεθόδων τύπου secant, οι οποίες θα παρουσιαστούν αργότερα [βλ [13], section 6, section 8].

Ένα επιπλέον σημαντικό μειονέκτημα της μεθόδου είναι η περίπτωση που η αντικειμενική συνάρτηση δεν είναι κυρτή. Σε αυτή την περίπτωση, ενώ η συνάρτηση μπορεί να έρθει σε σύγκλιση μέσω της μεθόδου, είναι πολύ πιθανό η λύση να είναι σαγματικό σημείο, καθώς η τιμή της ∇f είναι επίσης 0 και επομένως η λύση που παρουσιάζεται να απέχει από το πραγματικό ελάχιστο της συνάρτησης, μετατρέποντας τον αλγόριθμο σε μη αποτελεσματικό. Τέλος η απόδοση του αλγόριθμου εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την επιλογή καλού αρχικού σημείου x_0 . Μπορούμε να τροποποιήσουμε την κλασική μέθοδο Newton [5] ώστε να αντιμετωπίζει αποδοτικά προβλήματα μη κυρτών συναρτήσεων, είτε να κάνουμε χρήση άλλων μεθόδων όπως των Quasi-Newton οι οποίες παρουσιάζονται παρακάτω και αντιμετωπίζουν τα προβλήματα υπολογισμού παραγώγων.

Παραθέτουμε ένα θεώρημα, το οποίο αναφέρει ότι η μέθοδος έχει τοπικά τετραγωνική τάξη ακρίβειας.

Θεώρημα 2.6 (βλ. [13], Theorem 3.5). Υποθέτουμε ότι η f , είναι δύο φορές παραγωγίσιμη και ότι ο Εσσιανός $\nabla^2 f$ είναι Lipschitz συνεχής, σε μια γειτονιά ενός σημείου x^* στο οποίο ικανοποιούνται οι ικανές συνθήκες του θεωρήματος (2.3). Χρησιμοποιώντας ως βήμα επανάληψης το $x_{k+1} = x_k + p_k$, με p_k να είναι το βήμα Newton (2.18), ισχύουν τα παρακάτω:

(i) Εάν το αρχικό σημείο x_0 βρίσκεται επαρκώς κοντά στο x^* , τότε η ακολουθία συγκλίνει στο x^* .

(ii) Η ακολουθία έχει τετραγωνική τάξη ακρίβειας.

(iii) Η ακολουθία της βαθμίδας $\{\|\nabla f(x_k)\|\}$ έχει τετραγωνική σύγκλιση στο 0.

Η απόδειξη μπορεί να βρεθεί [βλ. [13], Proof Theorem 4.5].

2.3.4 Μέθοδοι Quasi-Newton

Η μέθοδος Quasi-Newton αναζητά μια κατεύθυνση καθόδου με πιο γρήγορη σύγκλιση από αυτή της μεθόδου των κλίσεων (gradient descent), χωρίς να απαιτεί τον υπολογισμό του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f(x_k)$ και του αντιστρόφου $\nabla^2 f(x_k)^{-1}$ που χρησιμοποιεί η μέθοδος Newton για τους οποίους, πολλές φορές, είτε είναι δύσκολο να υπολογιστούν, είτε απαιτούν μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Σκοπεύει να συνδυάσει λοιπόν την ταχεία σύγκλιση της μεθόδου Newton, δίχως να επιβαρύνει τον αλγόριθμο με μεγάλο υπολογιστικό κόστος τάξης $O(n^3)$. Αρχικά ορίζουμε την τετραγωνική συνάρτηση

$$m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p,$$

όπου ο πίνακας B_k είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Παίρνοντας την παράγωγο $\nabla_p m = 0$, προκύπτει και αποδεικνύεται ότι, το βήμα $p_k = B_k^{-1} \nabla f_k$ είναι το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης για θετικά ορισμένο Εσσιανό πίνακα, αφού είναι η λύση του γραμμικού συστήματος $B_k p = -\nabla f_k$ [βλ. Λήμμα (2)(i)] και χρησιμοποιείται ως κατεύθυνση καθόδου με βήμα α_k τέτοιο ώστε να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Η ιδέα πίσω από τη μέθοδο αυτή είναι ο πίνακας B_k να ανανεώνεται σε κάθε επανάληψη. Χρησιμοποιώντας τις δύο πληροφορίες, ότι η παράγωγος της συνάρτησης m_{k+1} πρέπει να ισούται με την παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης στις δύο τελευταίες επαναλήψεις x_k, x_{k+1} , έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \nabla m_{k+1}(0) &= \nabla f_{k+1}, \\ \nabla m_{k+1}(-\alpha p_k) &= \nabla f_{k+1} - \alpha_k B_{k+1} p_k = \nabla f_k. \end{aligned}$$

Από την δεύτερη εξίσωση παίρνουμε

$$B_{k+1} \alpha_k p_k = \nabla f_{k+1} - \nabla f_k,$$

συμβολίζοντας με

$$s_k := x_{k+1} - x_k = \alpha_k p_k, \quad (2.19)$$

$$y_k := \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k), \quad (2.20)$$

καταλήγουμε επομένως ότι οι μέθοδοι Quasi-Newton αντικαθιστούν τον $\nabla^2 f(x_k)$ με μια προσέγγιση B_k ο οποίος πρέπει να ικανοποιεί την παρακάτω συνθήκη γνωστή και ως Secant equation:

$$B_{k+1} s_k = y_k. \quad (2.21)$$

Χρησιμοποιούμε δύο γνωστούς φορμαλισμούς για τον προσεγγιστικό πίνακα B_{k+1} κάθε νέας επανάληψης, συγκεκριμένα τις BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) και SR1 (Symmetric Rank-one):

$$1. \quad B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \quad (\text{Symmetric Rank One Formula-SR1}). \quad (2.22)$$

$$2. \quad B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \quad (\text{BFGS Formula}). \quad (2.23)$$

Υπενθυμίζουμε ότι κατεύθυνση καθόδου είναι το διάνυσμα

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k, \quad (\text{κατεύθυνση καθόδου Quasi-Newton}). \quad (2.24)$$

Με τη χρήση των (2.22),(2.23) υπολογίζουμε προσεγγιστικά τον Εσσιανό βασιζόμενοι στα παράγωγα της f σε δύο σημεία και παρατηρούμε ότι η διαφορά των B_{k+1} και B_k είναι ένας πίνακας rank-one στην πρώτη περίπτωση αλλά ένας πίνακας rank-two στην δεύτερη. Ένα μειονέκτημα που έχει η SR1 φόρμουλα έναντι της BFGS είναι ότι ενώ διατηρεί την συμμετρία, δεν εγγυάται ότι ο πίνακας B_{k+1} θα είναι επίσης θετικά ορισμένος.

Όπως προαναφέραμε, κύριος στόχος μας είναι να αποφύγουμε τον υπολογισμό του αντιστρόφου πίνακα B_k^{-1} , καθώς απαιτεί μεγάλο κόστος υπολογισμού ($O(n^3)$ συγκεκριμένα) και έτσι μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση BFGS (2.23) με $H_k = B_k^{-1}$ ως εξής μέσω της φόρμουλας των Sherman-Morrison-Woodbury [13]:

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s_k y_k^T) H_k (I - \rho_k s_k y_k^T) + \rho_k s_k s_k^T, \quad \mu\epsilon \quad (2.25)$$

$$\rho_k = y_k^T s_k.$$

Σε αυτή την περίπτωση το βήμα καθόδου γράφεται ως εξής:

$$p_k = -H_k \nabla f(x_k).$$

Έχει αποδειχθεί ότι η φόρμουλα BFGS, έχει επίσης αποτελεσματικές αυτοδιορθωτικές ιδιότητες, δηλαδή αν σε κάποια επανάληψη εκτιμηθεί λανθασμένα η καμπυλότητα της αντικειμενικής συνάρτησης που προκύπτει από τον εσσιανό πίνακα, τότε η προσέγγιση του εσσιανού τείνει να διορθώσει αυτή την εκτίμηση στις επόμενες επαναλήψεις.

2.4 Μέθοδοι συζυγών κατευθύνσεων

Οι μέθοδοι των συζυγών κατευθύνσεων (Conjugate Direction Methods), αρχικά χρησιμοποιήθηκαν ως επαναληπτικές μέθοδοι για επίλυση γραμμικών συστημάτων και έπειτα τετραγωνικών συναρτήσεων με θετικά ορισμένο εσσιανό πίνακα.

Αρχικά παραθέτουμε κάποιους ορισμούς οι οποίοι είναι απαραίτητοι για τη συνέχεια.

Ορισμός 2.5 (βλ. [10], Definition 12.1). Ένα σύνολο μη μηδενικών διανυσμάτων $\{p_i\}_{i=0}^{n-1}$ καλείται συζυγές ως προς τον πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, συμμετρικό και θετικά ορισμένο, αν ισχύει $p_i^T A p_j = 0$ για $i, j = 0, 1, \dots, n-1$

Θεώρημα 2.7 (βλ. [10], Proposition 12.1). Έστω διανύσματα $\{p_i\}_{i=0}^{n-1}$ συζυγή ως προς $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ θετικά ορισμένο και συμμετρικό. Τότε είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

Παραθέτουμε το παρακάτω θεώρημα βασισμένοι στο [10]

Θεώρημα 2.8 (βλ. [10], Proposition 12.2). Για θετικά ορισμένο πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και $\{p_0, p_1, \dots, p_{n-1}\}$ ένα σύστημα με n συζυγή διανύσματα ως προς τον πίνακα A .

Ορίζουμε την παρακάτω τετραγωνική συνάρτηση $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$ και το βήμα της επανάληψης να είναι $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ με αρχικό σημείο x_0 και μήκος βήματος α_k στην κατεύθυνση καθόδου p_k . Τότε το α_k δίνεται απο τον τύπο:

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T p_k}{p_k^T A p_k} = -(A x_k - b)^T \cdot \frac{p_k}{p_k^T A p_k},$$

τότε για διανύσματα $g_i \neq 0$ για $i = 0, 1, \dots, n-1$, έχουμε

$$g_k^T p_i = 0,$$

για $i = 0, 1, \dots, n-1$ και επιπλέον υπάρχει $m < n-1$ τέτοιο ώστε να ισχύει x_{m+1} να είναι το ελάχιστο της συνάρτησης f .

2.4.1 Η μέθοδος των συζυγών κλίσεων

Όπως αναφέραμε οι μέθοδοι συζυγών κατευθύνσεων αρχικά κατασκευάστηκαν για να επιλύουν συστήματα της μορφής

$$A x = b$$

και αυτό ισοδυναμεί με την βελτιστοποίηση της τετραγωνικής συνάρτησης $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x$. Ορίζουμε την ποσότητα r_k η οποία ονομάζεται υπόλοιπο και ισούται με

$$r_k = A x_k - b = \nabla f(x_k).$$

Οι τεχνικές των συζυγών κλίσεων είναι μια κατηγορία συζυγών κατευθύνσεων με την ιδιότητα ότι, για να παράχθει ένα νέο βήμα p_k κάνει χρήση μόνο του τελευταίου διανύσματος p_{k-1} και δεν κάνει χρήση των προηγούμενων ενώ είναι αυτόματα συζυγής εξ'ορισμού σε αυτά. Αυτή η ιδιότητα κρίνεται ιδιαίτερα ελκυστική στην πράξη καθώς δεν απαιτεί μεγάλο υπολογιστικό χώρο και υπολογισμούς.

Στις μεθόδους συζυγών κλίσεων το διάνυσμα κατεύθυνσης p_k παράγεται απο γραμμικό συνδυασμό του υπολοίπου $-r_k$ (το οποίο ισούται με την κατεύθυνση απότομης καθόδου) και της προηγούμενης κατεύθυνσης p_{k-1} , δηλαδή γράφουμε:

$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1}, \quad (2.26)$$

με τη σταθερά β_k να καθορίζεται υπό την προϋπόθεση ότι τα διανύσματα p_{k-1}, p_k είναι συζυγή. Ορίζουμε τη σταθερά αυτή ως:

$$\beta_k = \frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}.$$

Παραθέτουμε ακόμη ένα θεώρημα βασισμένοι στο [13], ώστε να καταλήξουμε στην τελική μορφή του αλγόριθμου συζυγών κλίσεων.

Θεώρημα 2.9 (βλ. [13], Theorem 5.3). *Υποθέτουμε ότι η k -οστή επανάληψη που παράγεται απο την μέθοδο συζυγών κλίσεων δεν είναι η βέλτιστη επιλογή σημείου x^* που λύνει το πρόβλημα. Τότε ισχύουν τα παρακάτω:*

- $r_k^T r_i = 0$ για $i = 0, 1, \dots, k-1$
- $\text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_k\} = \text{span}\{r_0, A r_0, \dots, A^k r_0\}$
- $\text{span}\{p_0, p_1, \dots, p_k\} = \text{span}\{r_0, A r_0, \dots, A^k r_0\}$
- $p_k^T A p_i = 0$ για $i = 0, 1, \dots, k-1$

Τότε η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει στο x^* το πολύ σε n βήματα.

Η απόδειξη μπορεί να βρεθεί στο [βλ.[13], Proof Theorem 5.3].

Είμαστε πλέον σε θέση να γράψουμε τη βασική μορφή ενός αλγόριθμου συζυγών κλίσεων, όπου θα χρειαστεί στην συνέχεια, ώστε να ορίσουμε έναν αλγόριθμο τύπου Trust Region με τη χρήση μεθόδων συζυγών κλίσεων, πιο συγκεκριμένα τον αλγόριθμο του Steihaug.

Η παρακάτω μορφή του αλγόριθμου γράφεται σύμφωνα με τους Nocedal και Wright [13].

Algorithm 2 Αλγόριθμος Συζυγών Κλίσεων-Conjugate Gradient (CG)

Για δοσμένο x_0

Θέτουμε $r_0 \leftarrow Ax_0 - b$, $p_0 \leftarrow -r_0$, $k \leftarrow 0$

while $r_k \neq 0$ **do**

$$\alpha_k \leftarrow \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} \leftarrow r_k + \alpha_k A p_k$$

$$\beta_{k+1} \leftarrow \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

$$p_{k+1} \leftarrow -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

end while

Trust Region Methods

Στην βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς, οι τεχνικές εύρεσης ελαχίστου κατατάσσονται σε δύο θεμελιώδεις κατηγορίες: Οι τεχνικές Line Search που ήδη παρουσιάσαμε και οι τεχνικές Trust Region. Η εναλλακτική μέθοδος έναντι των τεχνικών Line Search με σκοπό την βελτιστοποίηση μιας συνάρτησης είναι η χρήση διαστημάτων εμπιστοσύνης (Trust Regions). Οι δύο μέθοδοι χρησιμοποιούν παρόμοιες τεχνικές, καθώς πρόκειται για επαναληπτικές μεθόδους του τετραγωνικού μοντέλου της αντικειμενικής συνάρτησης που όμως διαφέρουν στην χρήση του.

Οι μέθοδοι Trust Region αναζητούν περιοχές στις οποίες εμπιστευόμαστε το τετραγωνικό μοντέλο ως προσέγγιση για την αντικειμενική συνάρτηση και συνήθως η εκάστοτε περιοχή, είναι μια γειτονιά με κέντρο την τρέχουσα επανάληψη x_k . Οι τεχνικές Trust Region, είναι αξιόπιστες και ανθετικές, γιατί μπορούν να εφαρμοστούν σε μη κυρτά και σε κακώς ορισμένα προβλήματα σε αντίθεση με τη μέθοδο Newton για παράδειγμα, ενώ χρησιμοποιούν πληροφορία δεύτερης τάξης παραγώγου σε αντίθεση με τις τεχνικές Line Search. Η γενικότερη ιδέα του ορισμού των τεχνικών Trust Region παρουσιάζεται εδώ, κυρίως σύμφωνα με την προσέγγιση των Nocedal και Wright [13].

3.1 Η γενική ιδέα της μεθόδου Trust Region

Στην προηγούμενη ενότητα παραθέσαμε τις τεχνικές Line Search και πώς με τη χρήση τους αναζητούν το μήκος βήματος σε μια επιλεγμένη κατεύθυνση καθόδου. Σε αντίθεση με αυτή την προσέγγιση οι μέθοδοι Trust Region σε μια επανάληψη k , επιλέγουν ταυτόχρονα την κατεύθυνση και το μήκος βήματος βασισμένοι στο τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης [10]. Ας υποθέσουμε τώρα ότι για το αρχικό μας βήμα x_0 γνωρίζουμε προσεγγιστικά το μήκος του βέλτιστου βήματος που μπορούμε να επιλέξουμε. Προκύπτει έτσι η ερώτηση, πώς μπορούμε να επιλέξουμε το μέγιστο μήκος βήματος απο το αρχικό μας σημείο [6]; Η απάντηση έρχεται απο την χρήση του τετραγωνικού μοντέλου για την αντικειμενική συνάρτηση που χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση ελαχίστου της μεθόδου Newton.

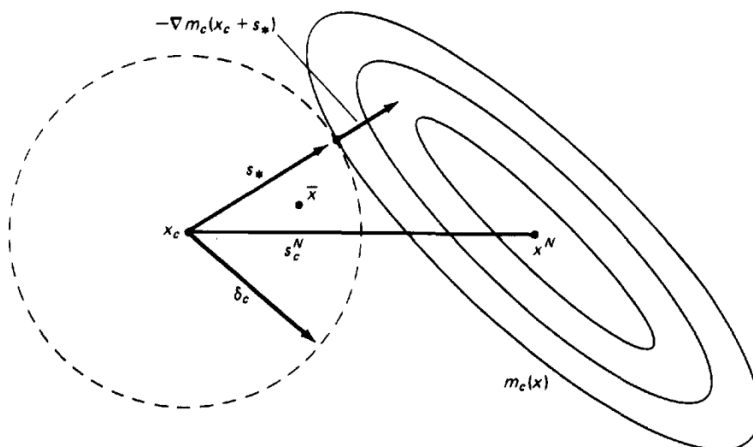
Με τη χρήση του θεωρήματος Taylor για την f στο x_k έχουμε:

$$m_k(p) = f_k + g_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \quad (3.1)$$

όπου $f(x_k) = f_k$, $g_k = \nabla f(x_k)$ ενώ ο πίνακας B_k είναι μια προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f_k$ με την ιδιότητα ότι είναι συμμετρικός. Γνωρίζοντας ότι το πλήρες βήμα $p_k = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k$ είναι το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης $m_k(p)$ η επιλογή του είναι λογική, για την περίπτωση που ο εσσιανός πίνακας είναι θετικά ορισμένος, διότι σε κάθε άλλη περίπτωση δεν ανακύπτει ελάχιστο για την συνάρτηση. Έτσι προσθέτοντας την ιδέα να φράξουμε το μέγιστο μήκος βήματος που μπορούμε να λάβουμε, προκύπτει η γενική ιδέα των μεθόδων Trust Region η οποία μπορεί να γραφεί για το πρόβλημα μιας επανάληψης ως:

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m(p) = f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p \quad \text{με} \quad \|p\| \leq \Delta, \quad (3.2)$$

με την θετική σταθερά Δ να χρησιμοποιείται για να ορίσει την ακτίνα της περιοχής αξιοπιστίας. Ουσιαστικά στις μεθόδους Trust Region, επιλέγουμε μια περιοχή στην οποία η συνάρτηση (3.1) είναι επαρκής προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης f σε μια γειτονιά γύρω από το σημείο x_k και στη συνέχεια αναζητούμε το βήμα που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση $m_k(p)$. Για την περίπτωση που το βήμα που επιλέχθηκε δεν επιφέρει ικανοποιητική μείωση της συνάρτησης f , περιορίζουμε την περιοχή που επιλέξαμε και επαναλαμβάνουμε την ίδια τεχνική. Συνήθως η περιοχή εμπιστοσύνης είναι σφαιρική καθώς χρησιμοποιούμε την Ευκλείδεια νόρμα και τον περιορισμό $\|p\| \leq \Delta$. Με Δ ονομάζουμε την ακτίνα της σφαίρας (Trust Region Radius).



Σχήμα 3.1: Trust Region και Contours της αντικειμενικής συνάρτησης [βλ. [6], Figure 6.4.1]

3.1.1 Trust Region Radius Δ_k

Η επιλογή της ακτίνας της σφαίρας συμβάλλει καταλυτικό ρόλο στην απόδοση του αλγορίθμου. Η ακτίνα Δ_k καθορίζεται με τέτοιο τρόπο ώστε να υπάρχει μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, ενώ ταυτόχρονα η αντικειμενική συνάρτηση και το τετραγωνικό μοντέλο να έρχονται σε συμφωνία στην περιοχή αξιοπιστίας που ορίζει η ακτίνα [10]. Μπορεί για επιλογές μικρής ακτίνας Δ_k , οι συναρτήσεις m_k και f να έρχονται σε συμφωνία, όμως αυτό ενδέχεται να

στερεί απο τον αλγόριθμο ένα μεγαλύτερο βήμα προς την λύση του προβλήματος. Απο την άλλη αν επιλεχθεί μεγάλη ακτίνα, μπορεί το ελάχιστο του μοντέλου m_k να διαφέρει αρκετά απο το ελάχιστο της f_k . Γενικά αν το μοντέλο μας είναι αξιόπιστο και προβλέπει σωστά την συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης, η περιοχή που περιοριζόμαστε μπορεί να επεκταθεί, όμως αν κάποιο βήμα μιας επανάληψης αποτύχει, πρέπει να ξανα μικρύνουμε την ακτίνα και να επαναλάβουμε την επανάληψη.

Παρακάτω ορίζουμε μια σημαντική ποσότητα για την συμφωνία μεταξύ του τετραγωνικού μοντέλου και της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή και για την απόδοση του αλγορίθμου [13]. Ορίζουμε τον αναλογικό όρο ρ_k ως:

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p)}, \quad (3.3)$$

όπου ο αριθμητής του κλάσματος απεικονίζει την πραγματική μείωση (actual reduction), ενώ ο παρονομαστής δείχνει την προβλεπόμενη μείωση (predicted reduction). Οι τιμές του ρ_k αντανακλούν την απόδοση του αλγορίθμου. Για τιμές κοντά στο 1, το μοντέλο είναι ακριβές, ενώ σε περιπτώσεις που η αναλογία ρ_k είναι ≤ 0 σημαίνει ότι το βήμα $x_k + p_k$ δεν δίνει επαρκή μείωση, ίσως και καθόλου, οπότε απορρίπτουμε το βήμα και επαναλαμβάνουμε στο x_k .

Την διαδικασία που περιγράφηκε συνοψίζει ο Αλγόριθμος (3) που παρουσιάζεται παρακάτω απο τους Nocedal και Wright [13]:

Algorithm 3 Trust Region

```

Για δοσμένο  $\Delta > 0$ ,  $\Delta_0 \in (0, \Delta^*)$ , και  $\eta \in (0, 1)$ .
for  $k \geq 0, 1, 2, \dots$  do
    Βρίσκω  $p_k$  υπολογίζοντας προσεγγιστικά την (2.14).
    Υπολογισμός  $\rho_k$  από (2.15).
    if  $\rho_k < \frac{1}{4}$  then
         $\Delta_{k+1} \leftarrow \frac{1}{4}\Delta_k$ 
    else
        if  $\rho_k > \frac{3}{4}$  and  $\|p_k\| \leq \Delta_k$  then
             $\Delta_{k+1} \leftarrow \min(2\Delta_k, \Delta^*)$ 
        else
             $\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$ 
        end if
        if  $\rho_k > \eta$  then
             $x_{k+1} \leftarrow x_k + p_k$ 
        else
             $x_{k+1} \leftarrow x_k$ 
        end if
    end if
end for

```

Προκύπτει πως, το υποψήφιο βήμα $x_k + p_k$ είναι αποδεκτό, μόνο αν επιφέρει επαρκή μείωση στην συνάρτηση $m_k(p)$ και εν συνεχεία αν οι συναρτήσεις $f_k, m_k(p)$ έρχονται σε συμφωνία [10]. Παρατηρούμε πώς η μόνη περίπτωση που επεκτείνουμε την ακτίνα, είναι όταν το βήμα μας φτάσει το όριο της περιοχής που έχουμε

θέσει δηλαδή $\|p_k\| = \Delta_k$, ενώ την οριοθετούμε με την τιμή Δ^* . Το πραγματικό πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε είναι ο υπολογισμός του βήματος p_k με τον οποίο θα ασχοληθούμε στο εξής.

3.2 Trust Region Subproblem

Ο αλγόριθμος (3) μας δίνει την γενική εικόνα επίλυσης προβλημάτων με τη χρήση μεθόδων Trust Region, όμως παραλείπει τον υπολογισμό του βήματος p_k ο οποίος επιτυγχάνεται λύνοντας το πρόβλημα:

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m(p) = f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p \quad \text{με} \quad \|p\| \leq \Delta. \quad (3.4)$$

Στην παραπάνω έκφραση της εξίσωσης (3.4) έχουμε παραλείψει τον επαναληπτικό όρο k για πρακτικούς λόγους (θα εργαστούμε στην περίπτωση μιας επανάληψης).

Η λύση του προβλήματος μπορεί να βρεθεί με ακριβή τρόπο αλλά και με προσεγγιστικό. Το παρακάτω θεώρημα υποδεικνύει την ακριβή λύση του υπό προβλήματος (3.4) [13] [7].

Θεώρημα 3.1 (βλ. [13], Theorem 4.1). Ένα διάνυσμα p είναι ολική λύση του υπό προβλήματος (3.4), αν και μόνο αν το p είναι εφικτό βήμα και υπάρχει θετική σταθερά $\lambda \geq 0$ τέτοια ώστε να ικανοποιούνται οι εξής συνθήκες:

$$(B + \lambda I)p^* = -g, \quad (3.5)$$

$$\lambda(\Delta - \|p^*\|) = 0, \quad (3.6)$$

$$(B + \lambda I) \text{ is positive definite.} \quad (3.7)$$

Θα χρειαστεί πρώτα η αναφορά ενός λήμματος ώστε να φτάσουμε στην απόδειξη του θεωρήματος [13].

Λήμμα 2 (βλ. [13], Lemma 4.7). Έστω η τετραγωνική συνάρτηση που ορίζεται ως:

$$m(p) = g^T p + \frac{1}{2} p^T B p, \quad (3.8)$$

όπου ο πίνακας B είναι συμμετρικός. Τα επόμενα ισχύουν:

- i) Η συνάρτηση $m(p)$ έχει ελάχιστο αν και μόνο αν ο πίνακας B είναι θετικά ημιορισμένος και η κλίση g είναι στο $\text{range}(B)$. Αν ο B είναι θετικά ημιορισμένος, τότε κάθε p που ικανοποιεί $Bp = -g$ είναι ολικό ελάχιστο της m .
- ii) Η συνάρτηση $m(p)$ έχει μοναδικό σημείο ελαχίστου αν και μόνο αν ο πίνακας B είναι θετικά ορισμένος.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Αποδεικνύουμε πρώτα το "αν" για την (i). Εφόσον η κλίση g είναι στο εύρος του B , υπάρχει ένα διάνυσμα p για το οποίο ισχύει $Bp = -g$. Για κάθε τυχαίο διάνυσμα $w \in \mathbb{R}$ ισχύει:

$$\begin{aligned}
 m(p+w) &= g^T(p+w) + \frac{1}{2}(p+w)^T B(p+w) \\
 &= (g^T p + \frac{1}{2}p^T Bp) + g^T w + (Bp)^T w + \frac{1}{2}w^T Bw \\
 &= m(p) + \frac{1}{2}w^T Bw \\
 &\geq m(p),
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

αφού ο B είναι θετικά ημιορισμένος. Έτσι, το διάνυσμα p είναι σημείο ελαχίστου για την m .

Αντιστροφώς, ας υποθέσουμε ότι το p είναι σημείο ελαχίστου της m . Αφού $\nabla m(p) = Bp + g = 0$, έχουμε ότι το g είναι στο εύρος του B . Επιπλέον έχουμε ότι $\nabla^2 m(p) = B$ είναι θετικά ορισμένος, άρα καταλήγουμε στο ζητούμενο αποτέλεσμα.

Αποδεικνύουμε τώρα το "αν" για την (ii), για το οποίο αρκούν όσα αναφέραμε για την (i) με την επιπλέον πληροφορία ότι $w^T Bw > 0$ όποτε $w \neq 0$. Για την ισοδυναμία, εργαζόμαστε όπως και πριν ώσπου να συμπεράνουμε ότι ο B είναι θετικά ημιορισμένος. Στην περίπτωση τώρα, που ο B δεν είναι θετικά ορισμένος, υπάρχει διάνυσμα $w \neq 0$ για το οποίο ισχύει $Bw = 0$. Έτσι απο την (3.9) έχουμε ότι $m(p+w) = m(p)$, επομένως το ελάχιστο δεν είναι μοναδικό, άτοπο.

□

Προχωράμε τώρα στην απόδειξη του θεωρήματος 3.1 [βλ. [13], Proof Theorem 4.1].

ΑΠΟΔΕΙΞΗ (ΘΕΩΡΗΜΑ 3.1): Υποθέτουμε αρχικά ότι υπάρχει $\lambda \geq 0$ τέτοιο ώστε οι συνθήκες (3.5),(3.6),(3.7) ικανοποιούνται. Μέσω του λήμματος (2)(i) για τον πίνακα $(B + \lambda I)$ προκύπτει ότι το p^* είναι ολικό ελάχιστο της συνάρτησης

$$\hat{m}(p) = g^T p + \frac{1}{2}p^T (B + \lambda I)p = m(p) + \frac{\lambda}{2}p^T p. \tag{3.10}$$

Εφόσον $\hat{m}(p) \geq \hat{m}(p^*)$, έχουμε απο (3.10) οτι:

$$m(p) \geq m(p^*) + \frac{\lambda}{2}((p^*)^T (p^*) - p^T p), \tag{3.11}$$

απο τις υποθέσεις μας ισχύει: $\lambda(\Delta - \|p^*\|) = 0$ άρα ισοδύναμα και $\lambda(\Delta^2 - \|p^*\|^2) = 0$, επομένως η (3.11) μας δίνει:

$$m(p) \geq m(p^*) + \frac{\lambda}{2}(\Delta^2 - (p^*)^T p^*),$$

έτσι και αφού $\lambda \geq 0$ έχουμε $m(p) \geq m(p^*)$ για όλα τα p , υπό τον περιορισμό $\|p\| \leq \Delta$. Επομένως το p^* είναι ολικό ελάχιστο της (3.4). Για το αντίστροφο, υποθέτουμε ότι το p^* είναι ολικό ελάχιστο και θα αποδείξουμε ότι υπάρχει $\lambda \geq 0$ το οποίο ικανοποιεί τις συνθήκες του θεωρήματος (3.1). Αρχικά για την περίπτωση

που το $\|p^*\| \leq \Delta$, το p^* είναι ελάχιστο χωρίς περιορισμούς, καθώς βρίσκεται εξ ολοκλήρου εντός περιοχής εμπιστοσύνης και επομένως ισχύει:

$$\nabla m(p^*) = Bp^* + g = 0, \quad \nabla^2 m(p^*) = B \text{ θετικά ημιορισμένος.} \quad (3.12)$$

Επομένως ισχύουν οι συνθήκες για $\lambda = 0$. Για το υπόλοιπο της απόδειξης υποθέτουμε πως $\|p^*\| = \Delta$, έτσι αυτόματα ικανοποιείται η (3.6) και το p^* επιλύει το πρόβλημα

$$\min m(p), \quad \text{με περιορισμό } \|p\| = \Delta. \quad (3.13)$$

Τώρα, εφαρμόζοντας τις συνθήκες βελτιστοποίησης για προβλήματα με περιορισμούς, βρίσκουμε ότι υπάρχει λ τέτοιο ώστε η παρακάτω Lagrangian να ορίζεται ως εξής:

$$\mathcal{L}(p, \lambda) = m(p) + \frac{\lambda}{2}(p^T p - \Delta^2)$$

και έχει στάσιμο σημείο στο p^* . Θέτοντας $\nabla_p \mathcal{L}(p^*, \lambda)$ ίσο με το μηδέν, έχουμε:

$$Bp^* + g + \lambda p^* = 0 \implies (B + \lambda I)p^* = -g. \quad (3.14)$$

Άρα ισχύει και η (3.5). Εφόσον $m(p) \geq m(p^*)$ για κάθε p με $p^T p = (p^*)^T p^* = \Delta^2$ υπάρχουν διανύσματα p για τα οποία ισχύει:

$$m(p) \geq m(p^*) + \frac{1}{2}((p^*)^T p^* - p^T p).$$

Αντικαθιστώντας την έκφραση για το g μέσω της (3.14) και έπειτα απο υπολογισμούς προκύπτει:

$$\frac{1}{2}(p - p^*)^T (B + \lambda I)(p - p^*) \geq 0. \quad (3.15)$$

Αφού το σύνολο των μοναδιαίων κατευθύνσεων

$$\left\{ w : w = \pm \frac{p - p^*}{\|p - p^*\|}, \quad \text{για κάποιο } p \text{ με } \|p\| = \Delta \right\}$$

είναι πυκνό στη μοναδιαία σφαίρα και επομένως απο την (3.15) προκύπτει ότι ισχύει η (3.7) $\rightarrow (B + \lambda I)$ είναι θετικά ημιορισμένος.

Μένει να αποδείξουμε ότι $\lambda \geq 0$. Αφού ικανοποιούνται οι (3.5),(3.6) απο το p^* έχουμε απο το Λήμμα (2)(i), ότι το p^* ελαχιστοποιεί το \hat{m} και αρα ισχύει η (3.11). Ας υποθέσουμε ότι μόνο αρνητικές ιδιοτιμές του λ ικανοποιούν τις (3.5),(3.6). Τότε απο την (3.11) έχουμε ότι $m(p) \geq m(p^*)$ όποτε $\|p\| \geq \|p^*\| = \Delta$. Γνωρίζοντας ήδη ότι το p^* ελαχιστοποιεί την m για $\|p\| \leq \Delta$, προκύπτει ότι το p^* είναι ολικό ελάχιστο της συνάρτησης. Ξανα απο το Λήμμα (2)(i) έχουμε ότι $Bp = -g$ και ότι ο είναι θετικά ημιορισμένος, άρα οι συνθήκες (3.5),(3.6) ικανοποιούνται και απο την τιμή $\lambda = 0$, το οποίο έρχεται αντίθετο με την υπόθεση μας ότι μόνο αρνητικές ιδιοτιμές ικανοποιούν τις συνθήκες. Επομένως $\lambda \geq 0$ ολοκληρώνοντας την απόδειξη. □

Το συγκεκριμένο θεώρημα χρίζει μεγάλης σημασίας και συγκεκριμένα αναφέρει ότι μία απο τις μη αρνητικές ποσότητες της (3.6) πρέπει να λαμβάνει μηδενική τιμή, δηλαδή σε περιπτώσεις όπου η λύση βρίσκεται στο εσωτερικό της σφαίρας έχουμε $\lambda = 0$ απο την (3.6), επομένως και $Bp^* = -g$ απο την (3.5) για B θετικά ημιορισμένο (3.7). Η τιμή λ λαμβάνει θετικές τιμές όταν η λύση αγγίζει τα ορία της σφαιρικής περιοχής, δηλαδή $\|p^*\| = \Delta$. Παρατηρούμε ότι το διάνυσμα p^* είναι συγγραμικό με την κλίση της συνάρτησης $m(p)$ καθώς ισχύει:

$$-\nabla m(p^*) = -Bp^* - g = -\lambda p.$$

3.2.1 Το σημείο Cauchy (Cauchy Point)

Ιδανικά, η εύρεση της ακριβούς βέλτιστης λύσης του υπο προβλήματος είναι αυτή που αναζητούμε, μπορεί όμως να προκύψει ολική σύγκλιση χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση της λύσης p_k η οποία δίνει επαρκή μείωση της συνάρτησης $m(p)$. Ορίζουμε το σημείο Cauchy p_k^C σύμφωνα με [βλ. [13], Algorithm 4.2], το οποίο μπορούμε μετέπειτα να ποσοτικοποιήσουμε την μείωση που θέλουμε να πετύχουμε. Αρχικά ορίζουμε το διάνυσμα p_k^S το οποίο ελαχιστοποιεί την γραμμική μορφή της προσεγγιστικής συνάρτησης $m(p)$:

$$p_k^S = \arg \min_{p \in \mathbb{R}^n} (f_k + g_k^T p) \quad \text{υπό τον περιορισμό} \quad \|p\| \leq \Delta, \quad (3.16)$$

όπου με g_k συμβολίζουμε το διάνυσμα κλίσης της f_k , ή αλλιώς βαθμίδα, όπως το ορίστηκε [βλ. ορισμός (1.10)]. Εύκολα αποδεικνύεται ότι η λύση του παραπάνω προβλήματος είναι:

$$p_k^S = -\frac{\Delta_k}{\|g_k\|} g_k.$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Ορίζουμε αρχικά την Lagrangian για το συγκεκριμένο πρόβλημα η οποία γράφεται ως:

$$\mathcal{L}(p, \lambda) = f + g^T p + \lambda(p^T p - \Delta),$$

υπό τον περιορισμό $\|p\| - \Delta \leq 0$. Παραγωγίζοντας την συνάρτηση ως προς p και λ και απαιτώντας να μηδενίζεται παίρνουμε:

$$(\alpha) \quad \nabla_p \mathcal{L} = g + \lambda \frac{p}{\|p\|} = 0 \Rightarrow \lambda \frac{p}{\|p\|} = -g,$$

$$(\beta) \quad \nabla_\lambda \mathcal{L} = 0 \Rightarrow \|p\| - \Delta = 0 \Rightarrow \|p\| = \Delta.$$

Παίρνοντας νόρμες στην (α) απο τις εξισώσεις μηδενισμού των μερικών παραγώγων, έχουμε:

$$\left\| \lambda \frac{p}{\|p\|} \right\| = \|g\|$$

άρα αφού $\left\| \frac{p}{\|p\|} \right\| = 1$, έχουμε ότι

$$\lambda = \|g\|$$

αφού $\lambda \geq 0$. Αντικαθιστώντας απο την (β) ότι $\|p\| = \Delta$, παίρνουμε απο την εξίσωση (α) :

$$\|g\| \frac{p}{\Delta} = -g \Rightarrow p = -\Delta \frac{g}{\|g\|}.$$

□

Επειτα καλούμαστε να υπολογίσουμε μία σταθερά $\tau_k > 0$, η οποία ελαχιστοποιεί την συνάρτηση $m_k(\tau p_k^S)$ [βλ. ορισμό $m_k(p)$, (3.1)] και ταυτόχρονα ικανοποιεί τον περιορισμό, η λύση να βρίσκεται εντός περιοχής εμπιστοσύνης, δηλαδή:

$$\tau_k = \arg \min_{\tau \geq 0} m_k(\tau p_k^S), \quad \|\tau p_k^S\| \leq \Delta_k. \quad (3.17)$$

Επομένως, το σημείο Cauchy ορίζεται ως:

$$p_k^C = \tau_k p_k^S = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|g_k\|} g_k.$$

Μένει να λύσουμε το πρόβλημα (3.17) ώστε να λάβουμε ακριβή τιμή του τ_k . Θα χρειαστεί να εξετάσουμε δύο περιπτώσεις, την $g_k^T B_k g_k \leq 0$ και $g_k^T B_k g_k > 0$. Για την πρώτη περίπτωση έχουμε για την παράγωγο της συνάρτησης $m_k(\tau p_k^S)$ ότι ισχύει:

$$\frac{dm_k(\tau p_k^S)}{d\tau} = -\Delta_k \|g_k\| + \tau \Delta_k \frac{g_k^T B_k g_k}{\|g_k\|^2} < 0,$$

επομένως η συνάρτηση φθίνει καθώς το τ μεγαλώνει, όταν ισχύει $\|g_k\| \neq 0$, συνεπώς η μεγαλύτερη τιμή του τ_k η οποία ικανοποιεί τον περιορισμό της ακτίνας της περιοχής είναι η λύση του προβλήματος, δηλαδή $\tau_k = 1$. Όσον αφορά τη δεύτερη περίπτωση $g_k^T B_k g_k > 0$, ισχύει ότι αφού ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος και συμμετρικός, η συνάρτηση $m_k(\tau p_k^S)$ είναι κυρτή στο τ . Άρα προκύπτουν δύο πιθανές λύσεις,

1. Αρχικά, λόγω κυρτότητας για το σημείο ελαχίστου που προκύπτει απο την:

$$\frac{dm_k(\tau p_k)}{d\tau} = 0 \iff \tau_k = \frac{\|g_k\|^3}{\Delta_k g_k^T B_k g_k}.$$

2. Η μέγιστη τιμή που μπορεί να λάβει το τ_k ώστε η λύση να βρίσκεται εντός Trust Region, δηλαδή $\tau_k = 1$.

Όποια απ' τις δύο τιμές εμφανίζεται πρώτη, λύνει και το πρόβλημα (3.17), επομένως για το σημείο Cauchy τελικά ισχύει

$$p_k^C = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|g_k\|} g_k \quad (3.18)$$

όπου

$$\tau_k = \begin{cases} 1, & \text{αν } g_k^T B_k g_k \leq 0 \\ \min\left(\frac{\|g_k\|^3}{\Delta_k g_k^T B_k g_k}, 1\right), & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Η χρήση του σημείου Cauchy μπορεί να φανεί πολύ χρήσιμη στην αναζήτηση ελαχίστου για δύο λόγους.

(I) Αποδεικνύεται ότι ένας αλγόριθμος Trust Region φτάνει σε ολική σύγκλιση εάν το επιλεγμένο βήμα p_k , επιφέρει μια μείωση της προσεγγιστικής συνάρτησης m_k όσο μια θετική σταθερά πολλαπλασιασμένη με την μείωση που επέρχεται χρησιμοποιώντας το σημείο Cauchy.

(II) Δεν απαιτεί παραγοντοποιήσεις πινάκων και επομένως δεν είναι ιδιαίτερα κοστοβόρα υπολογιστικά.

Σε πολλές περιπτώσεις μπορεί να καταλήξει σε καλή προσέγγιση της λύσης, καθώς ακολουθεί την κατεύθυνση της απότομης κατάβασης (steepest descent), η οποία όμως συχνά ενδέχεται να μην αποδίδει άρτια. Επομένως αναζητούμε τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε περαιτέρω πληροφορίες ώστε να αντιμετωπίζουμε τα προβλήματα που προκύπτουν όταν το σημείο Cauchy δεν αποδίδει επαρκώς. Στις περιπτώσεις όπου $t_k = 1$ σημαίνει ότι έχουμε φτάσει στο όριο του διαστήματος και επομένως το βήμα είναι βέλτιστο και αποδίδει σωστά. Για τις περιπτώσεις όπου $t_k < 1$ αναζητούμε μια βελτίωση της τεχνικής μας χρησιμοποιώντας παραπάνω πληροφορίες όπως ο αυτές που ενδέχεται να μας παρέχει ο εσσιανός πίνακας B_k . Η πρώτη μέθοδος που θα παρουσιάσουμε και αντλεί πληροφορία από τον πίνακα B_k , όμως απαιτεί να είναι θετικά ορισμένος, είναι η μέθοδος Dogleg (The Dogleg Method).

3.3 Η μέθοδος Dogleg για τεχνικές Trust Region

Μια βελτίωση της τεχνικής του σημείου Cauchy που αντλεί τις επιπλέον πληροφορίες που αναφέραμε είναι η μέθοδος Dogleg [13], κατά την οποία κάνουμε χρήση δύο ευθυγράμμων τμημάτων για να προσεγγίσουμε την τροχιά της λύσης του τετραγωνικού μοντέλου. Βασική προϋπόθεση ώστε ο αλγόριθμος να είναι αποδοτικός, είναι ο πίνακας B_k να είναι θετικά ορισμένος. Αρχικά, όπως γνωρίζουμε από το θεώρημα 2, αν ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος τότε το πλήρες βήμα $p_k^B = -B_k^{-1}g_k$ που προκύπτει από:

$$\nabla m_k(p) = 0 \iff g_k + p_k B_k = 0 \iff p_k^B = -B_k^{-1}g_k$$

ελαχιστοποιεί την συνάρτηση m_k αν και εφόσον είναι εφικτό βήμα (εντός περιοχής εμπιστοσύνης).

Παρακάτω δουλεύουμε στα πλαίσια μιας επανάληψης για λόγους απλότητας οπότε παραλείπουμε τον δείκτη k , ($p_k \rightarrow p$) και συμβολίζουμε το βήμα που επιλέγουμε με $p(\Delta)$ για να τονίσουμε την επιρροή της ακτίνας στην επιλογή του. Όταν το πλήρες βήμα είναι αρκετά μεγαλύτερο από την ακτίνα της σφαίρας, υπό τον περιορισμό $\|p\| \leq \Delta$, προκύπτει ότι ο τετραγωνικός όρος της συνάρτησης $m(p)$ δεν έχει ισχύ στην λύση του προβλήματος επομένως τον παραλείπουμε και εργαζόμαστε με το βήμα της απότομης καθόδου.

$$p^*(\Delta) \approx -\Delta \frac{g}{\|g\|}, \quad \text{για επιλογές μικρής ακτίνας } \Delta, \quad (3.19)$$

δηλαδή αντιμετωπίζουμε το πρόβλημα ως γραμμικό. Απο την άλλη, αν το πλήρες βήμα p^B είναι εντός Trust Region, δηλαδή ισχύει ότι $\|p^B\| \leq \Delta$, τότε επιλέγουμε ως βήμα της επανάληψης το p^B αφού είναι το βέλτιστο εφικτό βήμα που μπορούμε να λάβουμε. Για ενδιάμεσες τιμές του Δ (δηλαδή για $\|p^C\| < \Delta$ και $\|p^B\| > \Delta$ η τροχιά της λύσης $p^*(\Delta)$ είναι καμπύλη και η μέθοδος ουσιαστικά προσεγγίζει αυτή την τροχιά με δύο ευθύγραμμα τμήματα, ως εξής:

1. Το πρώτο ευθύγραμμο τμήμα ξεκινά από την αρχή και κινείται κατά την κατεύθυνση απότομης καθόδου ελαχιστοποιώντας την m , δηλαδή το σημείο:

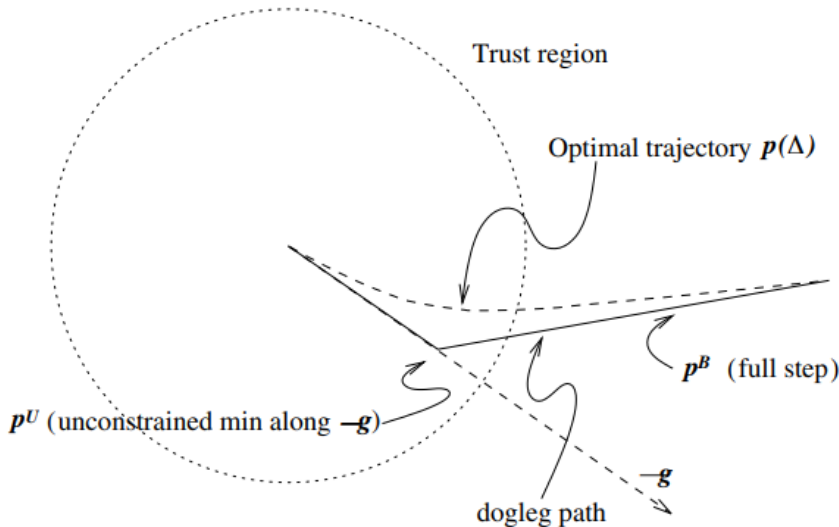
$$p^U = -\tau \frac{\Delta}{\|g\|} g = -\frac{\|g\|^3}{\Delta g^T B g} \cdot \frac{\Delta}{\|g\|} g = -\frac{\|g\|^2}{g^T B g} g. \quad (3.20)$$

2. Το δεύτερο ευθύγραμμο τμήμα κινείται από το σημείο p^U προς το πλήρες βήμα p^B .

Μπορούμε να γράψουμε την κατεύθυνση των τροχιών ορίζοντας μια συνάρτηση $\tilde{p}(\tau)$ για $\tau \in [0, 2]$ η οποία γράφεται ως εξής:

$$\tilde{p}(\tau) = \begin{cases} \tau p^U, & 0 \leq \tau \leq 1 \\ p^U + (\tau - 1)(p^B - p^U), & 1 \leq \tau \leq 2. \end{cases} \quad (3.21)$$

Σημείωση: Στην περίπτωση που το βήμα p^B βρίσκεται εκτός της σφαίρας, δηλαδή $\|p^B\| \geq \Delta$ τότε η παραπάνω διαδρομή $\tilde{p}(\tau)$, τέμνει την σφαίρα σε ένα μόνο σημείο. Επιπλέον, αφού η $m(p)$ είναι φθίνουσα σε αυτή την κατεύθυνση το βήμα θα επιλεχθεί να είναι το p^B αν ισχύει $\|p^B\| \leq \Delta$, διαφορετικά στο σημείο που η μέθοδος Dogleg τέμνει την σφαίρα.



Σχήμα 3.2: Το βήμα της μεθόδου Dogleg [βλ. [13], Figure 4.4]

Σημείωση: Παρατηρούμε ότι ο συνδυασμός των ευθυγράμμων τμημάτων Steepest Descent και Newton step, θυμίζουν πόδι σκύλου, απο όπου προκύπτει και η ονομασία της μεθόδου "Dogleg".

Με τη βοήθεια του παρακάτω λήμματος, αποδεικνύουμε ότι με τη χρήση της μεθόδου Dogleg, η εύρεση ελαχίστου της τετραγωνικής συνάρτησης $m(p)$ γίνεται εύκολα εφόσον πληρούνται οι προϋποθέσεις της [13].

Λήμμα 3 (βλ. [13], Lemma 4.2). Για θετικά ορισμένο πίνακα B ισχύει:

(I) Η $\tilde{p}(\tau)$ είναι αύξουσα συνάρτηση του τ .

(II) Η $m(\tilde{p}(\tau))$ είναι φθίνουσα συνάρτηση του τ .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Ξεκινάμε την απόδειξη για $\tau \in [0, 1]$. Ορίζουμε την συνάρτηση

$$\begin{aligned}\phi(\tau) &= \|\tilde{p}(\tau)\| = \|\tau p^U\|, \quad \text{με } p^U \text{ όπως ορίστηκε στην (3.20)} \\ &= \left\| -\tau \frac{\|g\|}{g^T B g} g \right\|, \\ &= \tau \frac{\|g\|^2}{\|g^T B g\|}, \quad \text{παραγωγίζοντας ως προς } \tau \text{ λαμβάνουμε,} \\ \phi'(\tau) &= \frac{\|g\|^2}{\|g^T B g\|} \geq 0.\end{aligned}$$

Συνεχίζουμε για την περίπτωση που $\tau \in [1, 2]$. Ορίζουμε τώρα την συνάρτηση $h(\alpha)$:

$$\begin{aligned}h(\alpha) &= \frac{1}{2} \|\tilde{p}(1 + \alpha)\|^2, \\ &= \frac{1}{2} \|p^U + \alpha(p^B - p^U)\|^2, \\ &= \frac{1}{2} \|p^U\|^2 + \alpha(p^U)^T(p^B - p^U) + \frac{1}{2} \alpha^2 \|p^B - p^U\|^2.\end{aligned}$$

Απομένει να αποδείξουμε ότι η παράγωγος $h'(\alpha)$ είναι μη αρνητική για $\alpha \in (0, 1)$, χρησιμοποιώντας ότι $p^U = -\frac{\|g\|^2}{g^T B g} g$ και $p^B = -B^{-1}g$:

$$\begin{aligned}h'(\alpha) &= -(p^U)^T(p^U - p^B) + \alpha \|p^U - p^B\|^2 \\ &\geq -(p^U)^T(p^U - p^B), \\ &= \frac{\|g\|^2}{g^T B g} g^T \left(\frac{\|g\|^2}{g^T B g} g + B^{-1}g \right) \\ &= \|g\|^2 \cdot \frac{g B^{-1}g}{g^T B g} \left[1 - \frac{\|g\|^4}{(g^T B g)(g^T B^{-1}g)} \right] \\ &\geq 0.\end{aligned} \tag{3.22}$$

Θα αποδείξουμε ότι η (3.22) είναι μη αρνητική.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ (3.22): Κανόντας χρήση της ανισότητας Cauchy Schwarz $[(u^T v)^2 \leq (u^T u)(v^T v)]$ για τα διανύσματα $u = \sqrt{B}g$ και $v = \sqrt{B^{-1}}g$ έχουμε :

$$\left((\sqrt{B}g)^T \sqrt{B^{-1}}g \right)^2 \leq \left((\sqrt{B}g)^T (\sqrt{B}g) \right) \left((\sqrt{B^{-1}}g)^T (\sqrt{B^{-1}}g) \right), \quad (3.23)$$

προκύπτει έτσι για το αριστερό μέρος της ανισότητας ότι:

$$\left((\sqrt{B}g)^T \sqrt{B^{-1}}g \right)^2 = \left(g^T \sqrt{B} \sqrt{B^{-1}}g \right)^2 = (g^T g)^2 = \|g\|^4, \quad (3.24)$$

αφού ο πίνακας B είναι συμμετρικός δηλαδή $B^T = B$.

Για την δεξιά μέρος της ανισότητας έχουμε:

$$\left((\sqrt{B}g)^T (\sqrt{B}g) \right) \left((\sqrt{B^{-1}}g)^T (\sqrt{B^{-1}}g) \right) = (g^T Bg)(g^T B^{-1}g). \quad (3.25)$$

Πάλι λόγω συμμετρίας έχουμε $(\sqrt{B}g)^T = g^T \sqrt{B}$ και επίσης $\sqrt{B} \cdot \sqrt{B} = B$.

Η ανίσωση (3.23) γράφεται σύμφωνα με τις (3.24) (3.25) ως:

$$\|g\|^4 \leq (g^T Bg)(g^T B^{-1}g) \iff 1 - \frac{\|g\|^4}{(g^T Bg)(g^T B^{-1}g)} \geq 0.$$

Άρα το εσωτερικό της παρένθεσης της (3.22) είναι μη αρνητικό, όπως και οι όροι εκτός της παρένθεσης αφού οι $\|g\|^2$ και $(g^T B^{-1}g)$, $(g^T Bg)$ είναι μη αρνητικοί όροι για θετικά ορισμένο πίνακα B και η αποδείξη της (3.22) έχει ολοκληρωθεί. \square

Για την απόδειξη του (II), ξεκινάμε και πάλι από $\tau \in [0, 1]$ και ορίζουμε:

$$\begin{aligned} \phi(\tau) &= m(\tilde{p}(\tau)) = f + g^T \tilde{p}(\tau) + \frac{1}{2} (\tilde{p}(\tau))^T B \tilde{p}(\tau) \\ &= f + g^T (\tau p^U) + \frac{1}{2} (\tau p^U)^T B (\tau p^U), \end{aligned} \quad (3.26)$$

παραγωγίζοντας ως προς τ και αντικαθιστώντας το p^C :

$$\begin{aligned} \phi'(\tau) &= -g^T \left(\frac{\|g\|^4}{g^T Bg} \right) + 2\tau \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\|g\|^2}{g^T Bg} g^T B \frac{\|g\|^2}{g^T Bg} g \\ &= -\frac{\|g\|^4}{g^T Bg} + \tau \cdot \frac{\|g\|^4}{g^T Bg} \leq 0, \end{aligned}$$

αφού $\tau \in [0, 1]$. Μένει τώρα να αποδείξουμε την περίπτωση που $\tau \in [1, 2]$. Όπως προηγουμένως ορίζουμε την $h(\alpha) = m(\tilde{p}(\alpha + 1))$ και θα δείξουμε ότι είναι μη αρνητική για $\alpha \in (0, 1)$.

Έχουμε μετά από αντικατάσταση της (3.21) και παραγωγήση ως προς α , εύκολα ότι:

$$\begin{aligned} h(\alpha) &= f + g^T (p^U + \alpha(p^B - p^U)) + \frac{1}{2} (p^U + \alpha(p^B - p^U))^T B (p^U + \alpha(p^B - p^U)) \quad \text{έτσι,} \\ h'(\alpha) &= (p^B - p^U)^T (g + Bp^U) + \alpha (p^B - p^U)^T B (p^B - p^U) \\ &\leq (p^B - p^U)^T (g + Bp^U + B(p^B - p^U)) \\ &= (p^B - p^U)^T (g + Bp^B) = 0. \end{aligned}$$

□

Για την περίπτωση που $\|p^B\| \geq \Delta$ για να βρούμε το σημείο τομής της τροχιάς $\tilde{p}(\tau)$ με την σφαίρα, καλούμαστε να λύσουμε την εξίσωση:

$$\|p^U + \alpha(p^B - p^U)\|^2 = \Delta^2. \quad (3.27)$$

Θεωρήσαμε την μεταβλητή $(\tau - 1) = \alpha$, επομένως ισχύει $\alpha \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} \iff (p^U + \alpha(p^B - p^U))^T (p^U + \alpha(p^B - p^U)) &= \Delta^2 \\ \iff \|p^U\|^2 + 2\alpha(p^U)^T(p^B - p^U) + \|\alpha(p^B - p^U)\|^2 - \Delta^2 &= 0. \end{aligned}$$

Θέτουμε $d = p^U - p^B$ και έχουμε

$$\|p^U\|^2 + 2\alpha d^T (p^U)^T + \alpha^2 \|d\|^2 - \Delta^2 = 0.$$

Επομένως μένει να λύσουμε αυτό το πολυώνυμο δευτέρου βαθμού ως προς α , δηλαδή προκύπτει:

$$\alpha = \frac{-d^T p^U \pm \sqrt{(d^T p^U)^2 + \|d\|^2 (\|p^U\|^2 - \Delta^2)}}{\|d\|^2}. \quad (3.28)$$

Μπορούμε επομένως πλέον να γράψουμε έναν αλγόριθμο, βασισμένο στην μέθοδο Dogleg, ακολουθώντας τα βήματα που παρουσιάσαμε έως τώρα και σύμφωνα με τους [13] [10] [2].

Algorithm 4 The Dogleg Method

Για δοσμένο $\Delta > 0$, $\Delta_0 \in (0, \Delta^*)$,

for $k \geq 1, 2, \dots$ **do**

Υπολογίζουμε το p_k^U από την (2.41) και το πλήρες βήμα p_k^B .

if $\|p_k^B\| \leq \Delta_k$ **then**

$$p_k = p_k^B$$

else if $\|p_k^U\| \geq \Delta_k$ **then**

$$p_k = -\Delta_k \frac{g_k}{\|g_k\|}$$

else if $\|p_k^B\| > \Delta_k$ & $\|p_k^U\| < \Delta_k$ **then**

Βρίσκουμε το $\alpha \in (0, 1)$ που ικανοποιεί την εξίσωση $\|p_k^U + \alpha(p_k^B - p_k^U)\| = \Delta_k$

$$p_k = p_k^U + \alpha(p_k^B - p_k^U)$$

end if

end for

Απο τον παραπάνω αλγόριθμο προκύπτουν κάποιες σημαντικές παρατηρήσεις:

- Στην περίπτωση που $\|p_k^U\| \geq \Delta_k$, το σημείο ελαχίστου ανήκει στο πρώτο κομμάτι ευθυγράμμου τμήματος και ισούται με το σημείο Cauchy.

- Απο την άλλη αν το σημείο ελαχίστου βρίσκεται στο δεύτερο κομμάτι ευθυγράμμου τμήματος, τότε το p_k είναι καλύτερη προσέγγιση απο ότι το σημείο p_k^C .
- Σε κάθε περίπτωση επομένως, $m(p_k) \leq m(p_k^C)$, πράγμα που όπως θα δούμε αρκεί για την σύγκλιση του αλγορίθμου.

Για την περίπτωση που είμαστε σε θέση να επιλέξουμε τον Εσσιανό $\nabla^2 f(x_k)$ αντί του πίνακα B_k , η μέθοδος καλείται Newton's Dogleg και το πλήρες βήμα είναι η κατεύθυνση καθόδου Newton $p_k^B = \nabla^2 f(x_k)^{-1} g_k$, ενώ επιτυγχάνουμε τον ίδιο χρόνο σύγκλισης με την απλή μέθοδο Newton. Καθώς η μέθοδος Dogleg εφαρμόζεται για θετικά ορισμένο πίνακα B_k , θα μπορούσαμε να μετατρέψουμε έναν singular πίνακα B_k σε θετικά ορισμένο, χρησιμοποιώντας κάποιες απο τις τεχνικές που αναφέραμε όπως η φόρμουλα BFGS ή άλλες μεθόδους εύρεσης ιδιοτιμών. Κάτι τέτοιο δεν θα ήταν αρκετά αποδοτικό, καθώς το p^B δεν θα ήταν το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης για $(B_k + \lambda I)$, έτσι καταφεύγουμε σε άλλες μεθόδους για αυτή την περίπτωση όπως αυτή που περιγράφεται παρακάτω.

3.4 Two Dimensional Subspace Minimization

Η μέθοδος 2D-Subspace αποδίδει εξίσου καλά για απροσδιόριστους πίνακες (μη θετικά ορισμένους). Για θετικά ορισμένο B_k εξελίσσει τη μέθοδο Dogleg, καθώς επεκτείνει την αναζήτηση βήματος στον δισδιάστατο χώρο που ορίζουν τα σημεία p^U και p^B , πιο συγκεκριμένα το υπο πρόβλημα ελαχιστοποίησης του τετραγωνικού μοντέλου γράφεται ως εξής [13] [7]:

$$\min_p m(p) = f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p, \quad \text{υπο τον περιορισμό} \quad \|p\| \leq \Delta, \quad p \in \text{span}[g, B^{-1}g]. \quad (3.29)$$

Με την χρήση της μεθόδου 2D subspace, επιτυγχάνουμε να μετατρέψουμε την αναζήτηση βήματος διάστασης n , σε δισδιάστατο πρόβλημα. Κάτι τέτοιο είναι εύκολο να καταλάβει κανείς οτι μειώνει σε μεγάλο βαθμό το υπολογιστικό κόστος του αλγορίθμου, ιδιαίτερα για προβλήματα μεγάλης διάστασης (μεγάλο n).

3.4.1 Περιπτώσεις για απροσδιόριστο πίνακα

Ήδη αναφερθήκαμε στην περίπτωση που ο B_k είναι θετικά ορισμένος πίνακας, στην οποία επιλέγουμε το πλήρες βήμα p^B αν είναι εφικτό, είτε αναζητούμε το βήμα στον δισδιάστατο χώρο που εκτείνεται απο τα σημεία p^U και p^B [βλ. εξίσωση (3.29)]. Για την περίπτωση που ο πίνακας B_k δεν είναι θετικά ορισμένος ξεχωρίζουμε δύο υποπεριπτώσεις:

- Ο πίνακας B_k έχει μηδενική ιδιοτιμή, αλλά όχι αρνητικές.
- Ο πίνακας B_k έχει τουλάχιστον μια αρνητική ιδιοτιμή.

Εάν ο πίνακας έχει μηδενική αλλά όχι αρνητικές ιδιοτιμές, επιλέγουμε ως βήμα p_k , το σημείο Cauchy p_k^C το οποίο καταλήγει σε σύγκλιση του αλγόριθμου. Εάν απο την άλλη, έχει έστω μια αρνητική ιδιοτιμή, δουλεύουμε με τον πίνακα

$(B_k + \alpha I)$, για $\alpha \in (-\lambda_1, -2\lambda_1]$, όπου με λ_1 συμβολίζουμε τη μικρότερη ιδιοτιμή του πίνακα B_k , εξασφαλίζοντας ότι ο νέος προσεγγιστικός πίνακας είναι θετικά ορισμένος. Προκύπτουν δύο νέες υποπεριπτώσεις σε αυτό το σημείο (παραλείπουμε τον όρο k):

$$(i) \|(B + \alpha I)^{-1}g\| > \Delta,$$

$$(ii) \|(B + \alpha I)^{-1}g\| \leq \Delta.$$

Στην πρώτη περίπτωση, εργαζόμαστε όπως και για θετικά ορισμένο πίνακα B_k δηλαδή αναζητούμε βέλτιστο βήμα p στον παρακάτω δισδιάστατο χώρο:

$$p \in \text{span}[g, (B + \alpha I)^{-1}g].$$

Η πιο δύσκολη περίπτωση που αντιμετωπίζουμε είναι η περίπτωση (ii). Αν ισχύει $\|(B + \alpha I)^{-1}g\| = \Delta$ το βήμα που επιλέγουμε είναι το

$$p = -(B + \alpha I)^{-1}g,$$

ενώ αν $\|(B + \alpha I)^{-1}g\| < \Delta$, επιλέγουμε το βήμα p να είναι το εξής:

$$p = -(B + \alpha I)^{-1}g + v. \quad (3.30)$$

Το διάνυσμα v επιλέγεται με τέτοιο τρόπο, ώστε να ισχύει : $v^T(B + \alpha I)^{-1}g \leq 0$, και να ικανοποιείται η συνθήκη $\|p\| \geq \|(B + \alpha I)^{-1}g\|$ [13]. Επεκτείνουμε δηλαδή το βήμα ως το όριο της σφαίρας, αφού το p είναι κατεύθυνση καθόδου, δηλαδή ισχύει $\|p\| = \|(B + \alpha I)^{-1}g + v\| = \Delta$.

ΑΠΟΔΕΙΞΗ:

$$\begin{aligned} \|p\|^2 &= \|(B + \alpha I)^{-1}g + v\|^2 \\ &= \|(B + \alpha I)^{-1}g\|^2 + \|v\|^2 - 2v^T(B + \alpha I)^{-1}g \geq \|(B + \alpha I)^{-1}g\|^2, \end{aligned}$$

αφού $v^T(B + \alpha I)^{-1}g \leq 0$.

□

Στις περιπτώσεις που είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε τον εσσιανό πίνακα $\nabla^2 f_k$ αντί του B_k και ο πίνακας είναι θετικά ορισμένος, χρησιμοποιούμε το βήμα Newton δηλαδή το $p = \nabla^2 f^{-1}g$. Όμως για μη θετικά ορισμένο πίνακα το βήμα Newton δεν είναι ολικό ελάχιστο της συνάρτησης και εργαζόμαστε όπως παραπάνω.

Είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς ότι με την χρήση της μεθόδου 2D Subspace, επιτυγχάνουμε τουλάχιστον την μείωση που επιφέρει το βήμα Cauchy (αρκεί για σύγκλιση), ενώ δύναται η μέθοδος να επιφέρει μείωση σχεδόν όσο και η ακριβής λύση του προβλήματος.

3.4.2 Μη θετικά ορισμένοι πίνακες

Όταν ερχόμαστε αντιμέτωποι με μη θετικά ορισμένο πίνακα σκοπός μας είναι να κατασκευάσουμε τον προσεγγιστικό θετικά ορισμένο πίνακα $(B + \alpha I)$. Πολλές φορές είναι δύσκολο και κοστοβόρο να εκτελέσουμε διάσπαση ιδιοτιμών για πίνακα

μεγάλης διάστασης. Για αυτό χρησιμοποιούμε αριθμητικές τεχνικές όπως τη μέθοδο Lanczos (μπορεί να βρεθεί στο [7]), ή την μέθοδο Power, οι οποίες υπολογίζουν προσεγγιστικά τις ακραίες ιδιοτιμές χωρίς μεγάλο υπολογιστικό κόστος, ενώ ακόμα μια τεχνική υπολογισμού προσεγγιστικού εσσιανού πίνακα η οποία εμφανίζει ικανοποιητικά αποτελέσματα είναι η τεχνική πεπερασμένης παραγωγίσης [13] [6].

3.5 Ο Αλγόριθμος συζυγών κλίσεων για τεχνικές Trust Region (CG Steihaug)

Στη συνέχεια αναζήτησης εξέλιξης του σημείου Cauchy, ο Trond Steihaug (1983), σχεδίασε έναν αλγόριθμο συζυγών κλίσεων ο οποίος λύνει προσεγγιστικά το υπο πρόβλημα Trust Region (3.4):

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m(p) = f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p \quad \text{με} \quad \|p\| \leq \Delta,$$

όπου για $B_k = \nabla^2 f_k$ η μέθοδος καλείται Newton CG Steihaug, ενώ παράγει το βήμα κατεύθυνσης p_k που χρησιμοποιείται στον αλγόριθμο (3) Trust Region, για κάθε επανάληψη k . [2]

Έχοντας αναφέρει συνοπτικά τις μεθόδους συζυγών κατευθύνσεων και συζυγών κλίσεων, έχοντας επίσης παρουσιάσει τη βασική μορφή ενός αλγόριθμου συζυγών κλίσεων καθώς και ποια είναι η χρήση του, θα παραθέσουμε τον αλγόριθμο του Steihaug συζυγών κλίσεων. Ουσιαστικά για επιλεγμένο διάνυσμα x άρα και τιμή των ∇f_k και B_k , αναζητούμε μέσα από την επαναληπτική διαδικασία των συζυγών κλίσεων ένα υποψήφιο βήμα p_k που θα χρησιμοποιήσουμε στον αλγόριθμο (3). Χρησιμοποιούμε του συμβολισμούς d_j για την αναζήτηση κατεύθυνσης του αλγόριθμου, ενώ με z_j συμβολίζουμε την ακολουθία των επαναληπτικών όρων που παράγει [13].

Algorithm 5 Conjugate Gradient Steihaug Algorithm-CG STEIHAUG

Για δοσμένο όριο ανοχής: $\varepsilon_k > 0$

Επιλογή αρχικών μεταβλητών: $z_0 = 0, r_0 = \nabla f_k, d_0 = -r_0 = -\nabla f_k$

if $\|r_0\| < \varepsilon_k$ **then return** $p_k = z_0 = 0$

end if

for $j = 0, 1, 2, \dots$ **do**

if $d_j^T B_k d_j \leq 0$ **then**

Βρίσκουμε τ τέτοιο ώστε $p_k = z_j + \tau d_j$ και ικανοποιεί $\|p_k\| \leq \varepsilon_k$ **return** p_k

end if

Θέτουμε $\alpha_j = \frac{r_j^T r_j}{d_j^T B_k d_j}$

Θέτουμε $z_{j+1} = z_j + \alpha_j d_j$

if $\|z_{j+1}\| \geq \Delta_k$ **then**

Βρίσκουμε $\tau \geq 0$ τέτοιο ώστε $p_k = z_j + \tau d_j$ και ικανοποιεί $\|p_k\| \leq \varepsilon_k$ **return**

p_k

end if

Θέτουμε $r_{j+1} = r_j + \alpha_j B_k d_j$

if $\|r_{j+1}\| < \varepsilon_k$ **then return** $p_k = z_{j+1}$

end if

Θέτουμε $\beta_{j+1} = \frac{r_{j+1}^T r_{j+1}}{r_j^T r_j}$

Θέτουμε $d_{j+1} = -r_{j+1} + \beta_{j+1} d_j$

end for

Ορισμένες απο τις αλλαγές που βλέπουμε σε σχέση με τον κλασσικό αλγόριθμο συζυγών κλίσεων είναι τα κριτήρια τερματισμού. Για παράδειγμα στο πρώτο "if statement" μέσα στην λούπα "for" το κριτήριο τερματισμού τίθεται αν η τρέχουσα κατεύθυνση d_j , είναι κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας κατά μήκος του B_k , ενώ κατά το δεύτερο "if statement" ο αλγόριθμος καλείται να διακοπεί, αν παραβιαστεί το όριο της περιοχής αξιοπιστίας απο το βήμα z_{j+1} . Σε κάθε περίπτωση η μέθοδος επιλέγει το βήμα p_k , που τέμνει το όριο της ακτίνας Trust Region στην κατεύθυνση της τρέχουσας επανάληψης. Ακόμα η επιλογή του ορίου ανοχής ε_k είναι σημαντική απο την σκοπιά του να παραμείνει χαμηλό το κόστος της μεθόδου.

Όσον αφορά το αρχικό σημείο επιλογής $z_0 = 0$, είναι σημαντικό χαρακτηριστικό του αλγόριθμου, ωστέ να ικανοποιηθούν οι ιδιότητες σύγκλισης του αλγόριθμου Trust Region, δηλαδή να υπάρξει μείωση ίση ή σημαντικότερη απο αυτή του σημείου Cauchy. Επιλέγοντας λοιπόν ως αρχικό σημείο το $z_0 = 0$, απο τον ορισμό των συζυγών κλίσεων προκύπτει ότι :

$$z_1 = a_0 d_0 = \frac{r_0^T r_0}{d_0^T B_k d_0} d_0 = -\frac{(\nabla f_k)^T \nabla f_k}{(\nabla f_k)^T B_k \nabla f_k} \nabla f_k.$$

Αν ικανοποιείται το πρώτο "if statement" της λούπας, παίρνουμε ως σημείο επιλογής το $p = -\Delta_k \frac{\nabla f_k}{\|\nabla f_k\|}$, ενώ αν ισχύει η ανισότητα $z_1 \leq \Delta_k$, τότε το βήμα z_1 , είναι ακριβώς το σημείο Cauchy και η τελική επανάληψη του αλγόριθμου εγγυάται ότι

$m_k(p) \geq m_k(z_1)$. Απο την άλλη αν ο αλγόριθμος τερματιστεί λόγω της δεύτερης συνθήκης "if" δηλαδή να ξεπεράσει το όριο της περιοχής αξιοπιστίας τότε επιλέγουμε ακριβώς το σημείο Cauchy ως βήμα. Επομένως για κάθε επιλογή βήματος του αλγόριθμου παρέχεται τουλάχιστον ίδια μείωση, με αυτή του σημείου Cauchy, που όπως θα δούμε αρκεί για ολική σύγκλιση.

Τέλος ακόμα ένα κρίσιμο χαρακτηριστικό του αλγόριθμου είναι ότι κάθε επαναληπτικός όρος z_j , είναι μεγαλύτερος σε νόρμα απο τον προηγούμενο όρο z_{j-1} . Αυτό σημαίνει ότι η επαναληπτική διαδικασία μπορεί να σταματήσει όταν κάποιο βήμα πιάσει το όριο της περιοχής αξιοπιστίας και αυτό διότι κανένα άλλο βήμα δε θα επιφέρει μεγαλύτερη μείωση στην συνάρτηση τετραγωνικού μοντέλου m_k . Γράφουμε το παραπάνω σε μορφή θεωρήματος [13] [2].

Θεώρημα 3.2 (βλ. [13], Theorem 7.3). *Η ακολουθία διανυσμάτων $\{z_j\}$, που παράγεται απο τον αλγόριθμο (5), ικανοποιεί το εξής:*

$$0 = \|z_0\|_2 < \dots < \|z_j\|_2 < \|z_{j+1}\|_2 < \dots < \|p_k\|_2 < \Delta_k.$$

Η απόδειξη μπορεί να βρεθεί στο [βλ. [13], Proof Theorem 7.3].

Το παραπάνω θεώρημα είναι ακόμα ένα επακόλουθο του ορισμού του αρχικού βήματος ως $z_0 = 0$. Για θετικά ορισμένους πίνακες, θα μπορούσαμε να πούμε ότι οι μέθοδοι Dogleg και CG Steihaug μοιάζουν, καθώς και οι δύο κινούνται ξεκινώντας απο την κατεύθυνση απότομης καθόδου και προσδεύουν προς το πλήρες βήμα p_k^N για $B_k = \nabla^2 f_k$.

Τέλος, παρουσιάζεται μια μορφή του αλγόριθμου (3), σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο του Steihaug (5), που με τη χρήση του παράγεται το υποψήφιο βήμα p_k , της τρέχουσας επανάληψης.

Algorithm 6 Trust Region CG-Steihaug Method

Για δοσμένο $\Delta > 0$, $\Delta_0 \in (0, \Delta^*)$, και $\eta \in (0, 1)$.

for $k \geq 0, 1, 2, \dots$ **do**

Επιλογή υποψήφιου βήματος p_k που επιλέγεται μέσω του αλγόριθμου CG-Steihaug (5), με fixed B_k .

Υπολογισμος ρ_k .

if $\rho_k < \frac{1}{4}$ **then**

$\Delta_{k+1} \leftarrow \frac{1}{4}\Delta_k$

else

if $\rho_k > \frac{3}{4}$ and $\|p_k\| \leq \Delta_k$ **then**

$\Delta_{k+1} \leftarrow \min(2\Delta_k, \Delta^*)$

else

$\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$

end if

if $\rho_k > \eta$ **then**

$x_{k+1} \leftarrow x_k + p_k$

else

$x_{k+1} \leftarrow x_k$

end if

end if

end for

3.6 Ανάλυση Σύγκλισης Μεθόδων

Έχουμε ήδη αναφέρει ότι η μείωση που επιφέρει το βήμα Cauchy, αρκεί για σύγκλιση του αλγορίθμου. Πιο συγκεκριμένα αρκεί ένα θετικό κλάσμα της μείωσης που προκύπτει χρησιμοποιώντας το σημείο Cauchy ως επιλεγμένο βήμα. Παρακάτω παραθέτουμε ένα λήμμα στο οποίο παρουσιάζεται μια εκτίμηση της μείωσης που επέρχεται από το σημείο Cauchy βασισμένοι στο [13].

- Υπενθυμίζουμε τον ορισμό της τετραγωνικής συνάρτησης (3.1):

$$m_k(p) = f_k + g_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p,$$

με $f_k = f(x_k)$, $g_k = \nabla f(x_k)$ [βλ. ορισμό (1.10)] και B_k συμμετρικός $n \times n$ πίνακας.

3.6.1 Σύγκλιση της τετραγωνικής συνάρτησης

Λήμμα 4 (βλ. [13], Lemma 4.3). *Η εκτιμώμενη μείωση που επιφέρει το σημείο Cauchy στην τετραγωνική συνάρτηση $m(p)$ περιγράφεται με την παρακάτω ανισότητα:*

$$m_k(0) - m_k(p^C) \geq \frac{1}{2} \|g_k\| \min\{\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|}\} \quad (3.31)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Παραλείπουμε τον όρο k για λόγους απλότητας στην απόδειξη. Εξετάζουμε πρώτα την περίπτωση $g^T Bg \leq 0$, έτσι έχουμε

$$\begin{aligned} m(p^C) - m(0) &= m(-\Delta g / \|g\|) - f \\ &= -\frac{\Delta}{\|g\|} \|g\|^2 + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\|g\|^2} g^T Bg \\ &\leq -\Delta \|g\| \\ &\leq -\|g\| \min \left(\Delta, \frac{\|g\|}{\|B\|} \right) \end{aligned}$$

Οπότε ικανοποιείται η (3.31) για αυτή την περίπτωση. Εξετάζουμε τώρα για $g^T Bg > 0$ και $\frac{\|g\|^3}{\Delta g^T Bg} \leq 1$. Επομένως ισχύει,

$$p^C = -\frac{\|g\|^3}{\Delta g^T Bg} \cdot \frac{\Delta}{\|g\|} g = -\frac{\|g\|^2}{g^T Bg} g$$

και έτσι:

$$\begin{aligned} m(p^C) - m(0) &= -\frac{\|g\|^4}{g^T Bg} + \frac{1}{2} g^T Bg \frac{\|g\|^4}{(g^T Bg)^2} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\|g\|^4}{g^T Bg} \\ &\leq -\frac{1}{2} \frac{\|g\|^4}{\|B\| \|g\|^2} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\|g\|^2}{\|B\|} \\ &\leq -\frac{1}{2} \|g\| \min \left(\Delta, \frac{\|g\|}{\|B\|} \right), \end{aligned}$$

Επομένως ικανοποιείται και για αυτή την περίπτωση η (3.31). Αν από την άλλη η τιμή $\tau = 1$ προηγείται της $\tau = \frac{\|g\|^3}{\Delta g^T Bg}$, άρα ισχύει:

$$g^T Bg < \frac{\|g\|^3}{\Delta}. \quad (3.32)$$

Επομένως έχουμε:

$$\begin{aligned} m(p^C) - m(0) &= -\frac{\Delta}{\|g\|} \|g\|^2 + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\|g\|^2} g^T Bg \\ &\leq -\Delta \|g\| + \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\|g\|^2} \frac{\|g\|^3}{\Delta} \\ &= -\frac{1}{2} \Delta \|g\| \\ &\leq -\frac{1}{2} \|g\| \min \left(\Delta, \frac{\|g\|}{\|B\|} \right), \end{aligned}$$

επιβεβαιώνοντας το ζητούμενο αποτέλεσμα, επομένως η απόδειξη έχει ολοκληρωθεί.

□

Σημείωση: Μια γενική εκτίμηση της μείωσης που δέχεται η συνάρτηση $m(p)$ που χρησιμοποιούμε, όσον αφορά την ολική σύγκλιση ενός αλγόριθμου είναι η:

$$m_k(0) - m_k(p^C) \geq c_1 \|g_k\| \min\{\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|}\}. \quad (3.33)$$

Για κάποια σταθερά $c_1 \in (0, 1]$. Παρατηρούμε ότι η μείωση που προκύπτει με την επιλογή του σημείου Cauchy ικανοποιεί την (3.33) για $c_1 = \frac{1}{2}$. Σημειώνουμε επιπλέον, ότι οι μέθοδοι που παρουσιάσαμε (Dogleg, 2D Subspace) ικανοποιούν την παραπάνω ανισότητα αφού επιφέρουν τουλάχιστον την ίδια μείωση με το σημείο Cauchy, ενώ θα δείξουμε ότι κάτι τέτοιο αρκεί για ολική σύγκλιση ενός αλγόριθμου. Συνοφίζουμε όσα αναφέραμε για την σύγκλιση στο παρακάτω θεώρημα [13].

Θεώρημα 3.3 (βλ. [13], Theorem 4.4). *Θεωρώντας ένα τυχαίο διάνυσμα p_k για το οποίο ισχύει, $\|p_k\| \leq \Delta_k$ και $m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2(m_k(0) - m_k(p_k^C))$. Τότε το p_k ικανοποιεί την (3.33) με $c_1 = \frac{c_2}{2}$. Πιο συγκεκριμένα, αν το p_k είναι η ακριβής λύση του προβλήματος τότε ικανοποιεί την (3.33) με $c_1 = \frac{1}{2}$.*

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Εφόσον ισχύει $\|p_k\| \leq \Delta_k$, προκύπτει από το λήμμα 3 ότι:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2(m_k(0) - m_k(p_k^C)) \geq \frac{1}{2}c_2 \|g_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|}\right),$$

δίνοντας το ζητούμενο αποτέλεσμα. □

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ.

Με p^*, p^C, p^D, p^{2D} συμβολίζουμε το ακριβές ολικό ελάχιστο, το βήμα Cauchy, το βήμα Dogleg και το βήμα 2D Subspace αντίστοιχα. Για θετικά ορισμένο πίνακα B , είναι εύκολο να διαπιστώσει κανείς ότι η σύγκλιση έρχεται με την εξής σειρά:

$$m(p^*) \leq m(p^{2D}) \leq m(p^D) \leq m(p^C). \quad (3.34)$$

Αφού έχουμε ήδη αναφέρει ότι οι μέθοδοι Dogleg και 2D Subspace επιφέρουν τουλάχιστον την μείωση που επέρχεται από το βήμα Cauchy, ενώ το $\text{span}[g, B^{-1}g]$ της μεθόδου 2D Subspace περιέχει ολόκληρη τη διαδρομή Dogleg. Το ακριβές ολικό ελάχιστο προφανώς και επιφέρει τη μεγίστη πιθανή μείωση.

3.6.2 Ολική Σύγκλιση

Ένα πρώτο βήμα για την ανάλυση σύγκλισης των τεχνικών Trust Region, ήταν η ανάλυση σύγκλισης της τετραγωνικής συνάρτησης $m_k(p)$ που προσεγγίζει την πραγματική αντικειμενική συνάρτηση f , την οποία θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε. Σκοπός μας είναι τώρα, να δείξουμε ότι η ακολουθία $\|g_k\|$ έχει σημείο συσσώρευσης στο 0 και επομένως συγκλίνει στο σημείο αυτό για αυστηρά θετικό η , ενώ για $\eta = 0$ θα δείξουμε ότι έχει οριακό σημείο (limit point) στο μηδέν.

Προτού προχωρήσουμε στην απόδειξη των παραπάνω, κάνουμε μερικές υποθέσεις. Υποθέτουμε αρχικά ότι ο προσεγγιστικός πίνακας B_k είναι ομοιόμορφα φραγμένος σε νόρμα και ότι η f είναι κάτω φραγμένη στο σύνολο:

$$S \triangleq \{x \mid f(x) \leq f(x_0)\} \quad (3.35)$$

Τέλος επιτρέπουμε στο μήκος του βήματος να ξεπερνάει το όριο της ακτίνας Trust region, υπο την προϋπόθεση ότι παραμένει πολλαπλάσιο μιας θετικής σταθεράς της ακτίνας, δηλαδή:

$$\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k, \quad \text{για μια σταθερά } \gamma \geq 1 \quad (3.36)$$

Το παρακάτω θεώρημα χρησιμοποιεί τις παραπάνω υποθέσεις και βασίζεται στο [13], όπως και η απόδειξη του.

Θεώρημα 3.4 (βλ. [13], Theorem 4.5). Υποθέτουμε ότι $\eta = 0$, ενώ ισχύουν και οι προηγούμενες υποθέσεις, δηλαδή ότι $\|B_k\| \leq \beta$, για κάποια σταθερά β , η συνάρτηση f είναι κάτω φραγμένη στο σύνολο S [εξ. (3.35)] και η f είναι Lipschitz συνεχώς παραγωγίσιμη στη γειτονιά $S(R_0)$ για κάποιο $R_0 > 0$. Τέλος υποθέτουμε ότι οι προσεγγιστικές λύσεις του υπο προβλήματος (3.4) ικανοποιούν τις εξισώσεις (3.33) και (3.36) για θετικές σταθερές c_1, γ αντίστοιχα. Τότε ισχύει:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} g_k \rightarrow 0 \quad (3.37)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Χρησιμοποιώντας τον αναλογικό όρο $(\rho_k - 1)$ έχουμε:

$$\begin{aligned} |\rho_k - 1| &= \left| \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} - 1 \right| \\ &= \left| \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k) - (m_k(0) - m_k(p_k))}{m_k(0) - m_k(p_k)} \right| \\ &= \left| \frac{m_k(p_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} \right|. \end{aligned}$$

Απο το Θεώρημα Taylor έχουμε ότι:

$$f(x_k + p_k) = f(x_k) + g(x_k)^T p_k + \int_0^1 [g(x_k + tp_k) - g(x_k)]^T p_k dt, \quad (3.38)$$

για κάποιο $t \in (0, 1)$.

Προκύπτει χρησιμοποιώντας τον ορισμό της τετραγωνικής συνάρτησης $m_k(p)$ και την (3.38):

$$|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| = \left| \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k - \int_0^1 [g(x_k + tp_k) - g(x_k)]^T p_k dt \right| \quad (3.39)$$

$$\leq (\beta/2) \|p_k\|^2 + \beta_1 \|p_k\|^2. \quad (3.40)$$

Η εξίσωση (3.40) προκύπτει γνωρίζοντας ότι B_k είναι φραγμένος σε νόρμα και η g είναι Lipschitz συνεχής, με $\|p_k\| \leq R_0$ ώστε τα $x_k + p_k, x_k$ να ανήκουν στη γειτονιά $S(R_0)$, πιο συγκεκριμένα:

$$1. \|B_k\| \leq \beta ,$$

$$2. \int_0^1 \|g(x_k + tp_k) - g(x_k)\| dt \leq \int_0^1 \beta_1 \|x_k + tp_k - x_k\| dt \leq \int_0^1 \beta_1 t \|p_k\| dt \leq \beta_1 \|p_k\|^2 .$$

Υποθέτουμε τώρα ότι υπάρχει $\epsilon > 0$ και μια θετική σταθερά K , τέτοια ώστε να ισχύει:

$$\|g_k\| \geq \epsilon, \quad \text{για κάθε } k \geq K. \quad (3.41)$$

Απο την εξίσωση (3.33) παίρνουμε για $k \geq K$ ότι:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \|g_k\| \min \left(\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|B_k\|} \right) \quad (3.42)$$

$$\geq c_1 \epsilon \min \left(\Delta_k, \frac{\epsilon}{\beta} \right). \quad (3.43)$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (3.36), (3.40) παίρνουμε το εξής:

$$|m_k(p_k) - f(x_k + p_k)| \leq (\beta/2 + \beta_1) \gamma^2 \Delta_k^2.$$

Τελικά χρησιμοποιώντας και τη (3.43) προκύπτει:

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{(\beta/2 + \beta_1) \gamma^2 \Delta_k^2}{c_1 \epsilon \min(\Delta_k, \epsilon/\beta)}, \quad (3.44)$$

θέτουμε τώρα ένα όριο για την ακτίνα Δ_k το οποίο μπορεί να γραφεί ως:

$$\Delta_k \leq \tilde{\Delta} = \min \left(\frac{1}{2} \frac{c_1 \epsilon}{\gamma^2 (\beta/2 + \beta_1)}, \frac{R_0}{\gamma} \right), \quad (3.45)$$

όπου ο όρος R_0/γ , χρησιμοποιείται ώστε να ικανοποιείται το όριο που έχουμε θέσει για το βήμα δηλαδή

$$\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k \leq R_0 \cdot \frac{\gamma}{\gamma} = R_0.$$

Σημειώνουμε ότι, αφού $c_1 \leq 1$ και $\gamma \geq 1$ απο την (3.45) έχουμε:

$$\tilde{\Delta} \leq \frac{\epsilon}{(\beta + 2\beta_1)} \leq \frac{\epsilon}{\beta}$$

και έτσι αφού $\Delta_k \leq \tilde{\Delta}$, έχουμε ότι $\min(\Delta_k, \epsilon/\beta) = \Delta_k$. Συνεπώς η (3.44) μπορεί να γραφεί:

$$\begin{aligned} |\rho_k - 1| &\leq \frac{(\beta/2 + \beta_1) \gamma^2 \Delta_k^2}{c_1 \epsilon \Delta_k} \\ &= \frac{\gamma^2 \Delta_k (\beta/2 + \beta_1)}{c_1 \epsilon} \\ &\leq \frac{\gamma^2 \tilde{\Delta} (\beta/2 + \beta_1)}{c_1 \epsilon} \\ &\leq \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Έτσι για αυτή την περίπτωση έχουμε $\rho_k > \frac{1}{4}$ και απο τον αλγόριθμο (3), η επιλογή της ακτίνας για το επόμενο βήμα είναι $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$ για $\Delta_k \leq \tilde{\Delta}$. Επομένως συμπεραίνουμε ότι ο μόνος τρόπος να προκύψει μείωση της ακτίνας Δ_k είναι η περίπτωση όπου

$$\Delta_k \geq \tilde{\Delta}$$

και έτσι καταλήγουμε στο:

$$\Delta_k \geq \min(\Delta_K, \tilde{\Delta}/4), \quad \text{για κάθε } k \geq K. \quad (3.46)$$

Υποθέτουμε τώρα ότι υπάρχει μια υπακολουθία άπειρης διάστασης, τέτοια ώστε να ισχύει $\rho_k \geq \frac{1}{4}$. Για $k \geq K$ και $k \geq K$ έχουμε απο την (3.43) το εξής:

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x_{k+1}) &= f(x_k) - f(x_k + p_k) \\ &\geq \frac{1}{4}[m_k(0) - m_k(p_k)] \quad \text{με χρήση της (3.43) προκύπτει,} \\ &\geq \frac{1}{4}c_1 \epsilon \min(\Delta_k, \epsilon/\beta). \end{aligned}$$

Απο την δομή του αλγόριθμου Trust Region, συνεπάγεται ότι $f(x_k) \geq f(x_{k+1})$ για κάθε k , επομένως χρησιμοποιώντας αυτή την πληροφορία και επιπλέον γνωρίζοντας ότι η f είναι κάτω φραγμένη, άρα δεν μπορεί να παρέχεται επ' αόριστον μείωση, προκύπτει ότι:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (f(x_k) - f(x_{k+1})) = 0.$$

Το παραπάνω όριο μεταφράζεται με την ιδέα ότι, καθώς ο αλγόριθμος προχωρά οι διαφορές μεταξύ των επαναλήψεων τείνουν στο μηδέν, που σημαίνει ότι η συνάρτηση έρχεται σε σύγκλιση, όπως υποδεικνύει ο αλγόριθμος (3). Έτσι, συνδυάζοντας αυτή την πληροφορία με την παραπάνω ανισότητα έχουμε τελικά ότι:

$$\lim_{\substack{k \rightarrow \infty \\ k \in K}} \Delta_k = 0,$$

πράγμα το οποίο έρχεται σε αντίθεση με την ανίσωση (3.46). Έτσι δεν μπορεί να υπάρχει τέτοιου είδους άπειρη υπακολουθία K και επομένως έχουμε $\rho_k \geq \frac{1}{4}$ για κάθε k αρκετά μεγάλο. Σε αυτή την περίπτωση η ακτίνα μας Δ_k θα πολλαπλασιάζεται σε κάθε επανάληψη με τον όρο $(1/4)$, καταλήγοντας ξανά στο αποτέλεσμα $\lim_{k \rightarrow \infty} \Delta_k = 0$, πράγμα άτοπο για τον ίδιο λόγο με προηγουμένως. Επομένως η αρχική μας υπόθεση ότι:

$$\|g_k\| \geq \epsilon, \quad \text{για κάθε } k \geq K,$$

δεν ισχύει, δίνοντας μας το επιθυμητό αποτέλεσμα δηλαδή:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} g_k \rightarrow 0.$$

□

Θα ελέγξουμε τώρα για την περίπτωση $\eta > 0$, η οποία βασίζεται αρκετά στην παραπάνω απόδειξη [17] [13].

Θεώρημα 3.5 (βλ. [13], Theorem 4.6). Υποθέτουμε ότι $\eta \in (0, \frac{1}{4})$ στον αλγόριθμο (3). Ισχύουν οι υποθέσεις του θεωρήματος (3.3) δηλαδή, $\|B_k\| \leq \beta$, για κάποια σταθερά β , η συνάρτηση f είναι κάτω φραγμένη στο σύνολο S [εξ. (3.35)] και η f είναι Lipschitz συνεχώς παραγωγίσιμη στη γειτονιά $S(R_0)$ για κάποιο $R_0 > 0$. Τέλος υποθέτουμε ότι οι προσεγγιστικές λύσεις του υπο προβλήματος (3.4) ικανοποιούν τις εξισώσεις (3.33) και (3.36) για θετικές σταθερές c_1, γ αντίστοιχα. Τότε ισχύει:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k = 0 \quad (3.47)$$

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Θεωρούμε μια συγκεκριμένη θετική σταθερά m για την οποία ισχύει $g_m \neq 0$. Όπως και πριν, η συνάρτηση g είναι Lipschitz συνεχής στη γειτονιά $S(R_0)$, άρα ισχύει:

$$\|g(x) - g_m\| \leq \beta_1 \|x - x_m\|, \quad (3.48)$$

όπου με β_1 συμβολίζουμε τη σταθερά Lipschitz, για κάθε $x \in S(R_0)$. Ορίζουμε τώρα τις σταθερές ϵ, R για τις οποίες ισχύει:

$$\epsilon = \frac{1}{2} \|g_m\|, \quad R = \min \left(\frac{\epsilon}{\beta_1}, R_0 \right).$$

Σημειώνουμε ότι η σφαίρα

$$B(x_m, R) = \{x \mid \|x - x_m\| \leq R\},$$

εμπεριέχεται στο σύνολο $S(R_0)$ και επομένως η g είναι Lipschitz συνεχής στην σφαίρα $B(x_m, R)$. Έχουμε τώρα ότι:

$$x \in B(x_m, R) \Rightarrow \|g(x)\| \geq \|g_m\| - \|g(x) - g_m\|. \quad (3.49)$$

Όμως από την εξίσωση (3.48) και τον ορισμό της σφαίρας $B(x_m, R)$ προκύπτει ότι

$$\|g(x) - g_m\| \leq \beta_1 \cdot R \leq \beta_1 \cdot \frac{\epsilon}{\beta_1} = \epsilon$$

και επομένως η (3.49) με τη χρήση της $\epsilon = \frac{1}{2} \|g_m\|$ γράφεται ως:

$$\|g(x)\| \geq 2\epsilon - \epsilon = \epsilon. \quad (3.50)$$

Εάν τώρα όλη η ακολουθία $\{x_k\}_{k \geq m}$ βρίσκεται εντός της σφαίρας θα είχαμε $\|g_k\| \geq \epsilon > 0$ για όλα τα $k \geq m$. Κάτι τέτοιο δε μπορεί να ισχύει όπως αποδείξαμε ήδη στο θεώρημα (3.3). Επομένως η ακολουθία $\{x_k\}_{k \geq m}$ κάποια στιγμή εγκαταλείπει τη σφαίρα $B(x_m, R)$. Υποθέτουμε ότι ο δείκτης $l \geq m$ είναι τέτοιος ώστε η επανάληψη x_{l+1} είναι η πρώτη εκτός σφαίρας για την ακολουθία x_k . Εφόσον $\|g_m\| \geq \epsilon$ για $k = m, m+1, \dots, l$, χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.43), γράφουμε:

$$\begin{aligned} f(x_m) - f(x_{l+1}) &= \sum_{k=m}^l f(x_k) - f(x_{k+1}) \\ &\geq \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^l \eta [m_k(0) - m_k(p_k)] \\ &\geq \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^l \eta c_1 \epsilon \min \left(\Delta_k, \frac{\epsilon}{\beta} \right). \end{aligned}$$

Στον δείκτη αθροίσματος γράφουμε $x_k \neq x_{k+1}$ δηλαδή για τις επαναλήψεις του αλγόριθμου που κάποιο βήμα p_k έγινε. Αν τώρα ισχύει $\Delta_k \leq \frac{\epsilon}{\beta}$ για όλα τα $k = m, m+1, \dots, l$, έχουμε:

$$\begin{aligned} f(x_m) - f(x_{l+1}) &\geq \eta c_1 \epsilon \sum_{k=m, x_k \neq x_{k+1}}^l \Delta_k \geq \eta c_1 \epsilon R \\ &= \eta c_1 \epsilon \min\left(\frac{\epsilon}{\beta}, R_0\right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Αν τώρα είχαμε $\Delta_k \geq \frac{\epsilon}{\beta}$ για ορισμένα $k = m, m+1, \dots, l$, και έτσι έχουμε:

$$f(x_m) - f(x_{l+1}) \geq \eta c_1 \epsilon \cdot \frac{\epsilon}{\beta} \quad (3.52)$$

και επειδή η ακολουθία $\{f(x_k)\}_{k=0}^{\infty}$ είναι φθίνουσα και κάτω φραγμένη, προκύπτει ότι:

$$f(x_k) \downarrow f^*, \quad (3.53)$$

για κάποιο $f^* > -\infty$. Τώρα χρησιμοποιώντας τις (3.51),(3.52) μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{aligned} f(x_m) - f^* &\geq f(x_m) - f(x_{l+1}) \\ &\geq \eta c_1 \epsilon \min\left(\frac{\epsilon}{\beta}, \frac{\epsilon}{\beta_1}, R_0\right) > 0 \\ &= \frac{1}{2} \eta c_1 \|g_m\| \min\left(\frac{\|g_m\|}{2\beta}, \frac{\|g_m\|}{2\beta_1}, R_0\right) > 0. \end{aligned}$$

Εφόσον $f(x_k) - f^* \downarrow 0$, πρέπει να ισχύει $g_m \rightarrow 0$, δίνοντας μας το επιθυμητό αποτέλεσμα. □

3.6.3 Τοπική σύγκλιση των μεθόδων Trust Region τύπου Newton

Όπως ήδη αναφέραμε, οι μέθοδοι τύπου Newton παρέχουν ταχεία σύγκλιση στους αλγόριθμους που χρησιμοποιούν τεχνικές Trust Region. Ουσιαστικά αν στοχεύουμε σε τέτοια ταχύτητα σύγκλισης, περιμένουμε ότι το όριο της ακτίνας της σφαιρικής περιοχής αξιοπιστίας δεν παρεμβαίνει και ουσιαστικά γίνεται ανενεργό κοντά σε μια πιθανή λύση. Συγκεκριμένα θέλουμε τα βήματα που επιλέγουμε να είναι εντός της σφαίρας και να πλησιάζουν ολοένα και περισσότερο, ασυμπτωτικά δηλαδή το πλήρες βήμα Newton p_k^N . Παραθέτουμε ένα θεώρημα το οποίο συνοψίζει τα παραπάνω και αναφέρει ότι αν ικανοποιούνται οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης ο ακριβής εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f_k$ χρησιμοποιείται έναντι του B_k και παρέχεται υπεργραμμική σύγκλιση του αλγόριθμου, ενώ επιτυγχάνεται παρόμοια μείωση με αυτή του σημείου Cauchy στην αντικειμενική συνάρτηση. Το παρακάτω θεώρημα και η απόδειξη του είναι βασισμένα στους Nocedal και Wright [13].

Θεώρημα 3.6 (βλ. [13], Theorem 4.9). Έστω συνάρτηση f δύο φορές Lipschitz συνεχώς παραγωγίσιμη σε μια γειτονιά ενός σημείου x^* , στην οποία ικανοποιούνται οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης. Υποθέτουμε τώρα, ότι η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει στο x^* και πως για όλα τα αρκετά μεγάλα k , ο αλγοριθμος (3) Trust Region με B_k , επιλέγει βήματα p_k τα οποία ικανοποιούν την μείωση που επιφέρει το σημείο Cauchy της εξίσωσης (3.31) και πλησιάζουν ασυμπτωτικά το βήμα Newton, οπότε $\|p_k^N\| \leq \frac{1}{2}\Delta_k$, δηλαδή ισχύει:

$$\|p_k - p_k^N\| = o(\|p_k^N\|). \quad (3.54)$$

Επιπλέον το όριο της περιοχής αξιοπιστίας Δ_k γίνεται ανενεργό για όλα τα αρκετά μεγάλα k και η ακολουθία $\{x_k\}$, συγκλίνει υπεργραμμικά στο x^* .

ΑΠΟΔΕΙΞΗ: Θα δείξουμε ότι ισχύει $\|p_k^N\| \leq \frac{1}{2}\Delta_k$ και $\|p_k\| \leq \Delta_k$ για όλα τα αρκετά μεγάλα k , έτσι ώστε να επιλέγεται πάντα το σχεδόν βέλτιστο βήμα p_k για την (3.54). Για αρχή αναζητούμε ένα κάτω φράγμα της προβλεπόμενης μείωσης $m_k(0) - m_k(p)$ για αρκετά μεγάλα k . Έτσι υποθέτουμε ότι κάθε k είναι αρκετά μεγάλο ώστε ο όρος $o(\|p_k^N\|)$, να είναι μικρότερος του $\|p_k\|$. Όταν ισχύει $\|p_k\| \leq \Delta_k$, τότε έχουμε ότι $\|p_k\| \leq \|p_k^N\| + o(\|p_k^N\|) \leq 2\|p_k^N\|$, ενώ αν ισχύει $\|p_k^N\| > \frac{1}{2}\Delta_k$, έχουμε $\|p_k\| \leq \Delta_k < 2\|p_k^N\|$. Για κάθε περίπτωση επομένως, έχουμε

$$\|p_k\| \leq 2\|p_k^N\| \leq 2\|\nabla^2 f(x_k)^{-1}\| \|g_k\|,$$

οπότε ισχύει $\|g_k\| \geq \frac{1}{2}\|p_k^N\| / \|\nabla^2 f(x_k)^{-1}\|$.

Απο την εξίσωση (3.33) παίρνουμε

$$\begin{aligned} m_k(0) - m_k(p) &\geq c_1 \|g_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|g_k\|}{\|\nabla^2 f_k\|}\right) \\ &\geq c_1 \frac{\|g_k\|}{2\|\nabla^2 f_k^{-1}\|} \min\left(\|p_k\|, \frac{\|p_k\|}{2\|\nabla^2 f_k\| \|\nabla^2 f_k^{-1}\|}\right) \\ &= c_1 \frac{\|p_k\|^2}{4\|\nabla^2 f_k^{-1}\|^2 \|\nabla^2 f_k\|}. \end{aligned}$$

Τώρα, αφού $x_k \rightarrow x^*$ και χρησιμοποιώντας την συνέχεια της $\nabla^2 f_k$ και ότι ο πίνακας $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ορισμένος, συμπεραίνουμε ότι το παρακάτω φράγμα ισχύει για κάθε k αρκετά μεγάλο:

$$\frac{c_1}{4\|\nabla^2 f(x_k)^{-1}\|^2 \|\nabla^2 f(x_k)\|} \geq \frac{c_1}{8\|\nabla^2 f(x_k)^{-1}\|^2 \|\nabla^2 f(x^*)\|} \triangleq c_3,$$

με $c_3 > 0$, έτσι έχουμε:

$$m_k(0) - m_k(p) \geq c_3 \|p_k\|^2, \quad (3.55)$$

για κάθε αρκετά μεγάλο k . Απο την Lipschitz συνέχεια της $\nabla^2 f$ κοντά στο x^* και εφαρμόζοντας το θεώρημα Taylor έχουμε:

$$\begin{aligned} |(f(x_k) - f(x_k + p_k)) - (m_k(0) - m_k(p))| &= \left| \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x_k) p_k - \frac{1}{2} \int_0^1 [p_k^T \nabla^2 f(x_k + p_k) p_k] p_k dt \right| \\ &\leq \frac{L}{4} \|p_k\|^3, \end{aligned}$$

όπου με $L > 0$ συμβολίζουμε την Lipschitz σταθερά για $\nabla^2 f$. Έτσι απο τον ορισμό του όρου αναλογίας ρ_k και για αρκετά μεγάλο k , παίρνουμε:

$$|\rho_k - 1| \leq \frac{\|p_k\|^3(L/4)}{c_3\|p_k\|^2} = \frac{L}{4c_3}\|p_k\| \leq \frac{L}{4c_3}\Delta_k. \quad (3.56)$$

Τώρα η ακτίνα της σφαίρας μπορεί να δεχθεί μείωση μόνο αν $\rho_k < \frac{1}{4}$ (ή ότι επιλεχθεί στον αλγόριθμο μικρότερο του 1), άρα είναι φανερό απο την εξίσωση (3.56) ότι η ακολουθία $\{\Delta_k\}$ απομακρύνεται μακριά απο το μηδέν. Εφόσον $x_k \rightarrow x^*$, έχουμε ότι $\|p_k^N\| \rightarrow 0$ απο την (3.54). Επομένως το φράγμα του Trust region γίνεται ανενεργό για k αρκετά μεγάλο και το φράγμα $\|p_k^N\| \leq \frac{1}{2}\Delta_k$ ικανοποιείται πάντοτε.

Για να αποδείξουμε τώρα ότι η σύγκλιση είναι υπεργραμμική, χρησιμοποιούμε την πληροφορία ότι της τετραγωνικής σύγκλισης που παρέχει η μέθοδος Newton ισχύει ότι (βλ. [13], Theorem 3.5):

$$\|x_k + p_k^N - x^*\| = o(\|x_k - x^*\|^2), \quad (3.57)$$

το οποίο σημαίνει ότι $\|p_k^N\| = O(\|x_k - x^*\|)$ και κάνοντας χρήση της εξίσωσης (3.54) έχουμε:

$$\begin{aligned} \|x_k + p_k - x^*\| &\leq \|x_k + p_k^N - x^*\| + \|p_k^N - p_k\| \\ &= o(\|x_k - x^*\|^2) + o(\|p_k^N\|) = o(\|x_k - x^*\|), \end{aligned}$$

πράγμα που αποδεικνύει ότι η σύγκλιση είναι υπεργραμμική. □

Αριθμητικά Αποτελέσματα

Στο παρόν κεφάλαιο θα επιδείξουμε διάφορα αριθμητικά αποτελέσματα συναρτήσεων για τις περισσότερες από τις μεθόδους που αναφέρθηκαν παραπάνω στα πλαίσια σύγκρισης των μεθόδων σε ταχύτητα και σύγκλιση, ενώ θα ελέγξουμε και την συμπεριφορά των αλγόριθμων σε παραδείγματα μεγάλης κλίμακας (Large scale), όπου το υπολογιστικό κόστος μεγαλώνει. Θα ελέγξουμε αρχικά αν οι αλγόριθμοι είναι αποδοτικοί για θεμελιώδεις συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται στην αριθμητική βελτιστοποίηση όπως η συνάρτηση Rosenbrock και θα προχωρήσουμε με πιο σύνθετες συναρτήσεις. Οι αλγόριθμοι, γράφτηκαν και προγραμματίστηκαν σε Matlab, ενώ οι γραφικές προγραμματίστηκαν σε Matlab και Python.

Στα πλαίσια των αριθμητικών εφαρμογών έγινε χρήση των αλγόριθμων:

- Backtracking Line Search με κατεύθυνση Steepest Descent
- Newton's Method
- Trust Region Dogleg Method
- Trust Region CG Steihaug

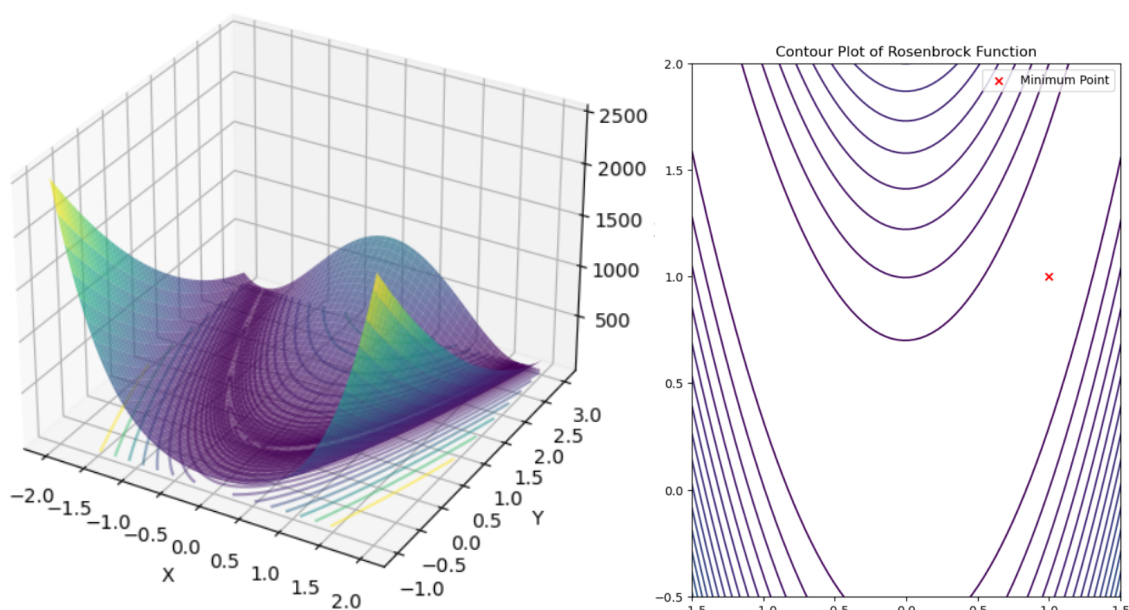
στις παρακάτω συναρτήσεις οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν ως test functions:

Function	$f_i(x)$	n
$f_1(x)$	$100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$	2
$f_2(x)$	$\sin(x_1) + (x_2 - x_1)^2$	2
$f_3(x)$	$(x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$	2
$f_4(x)$	$\sum_{i=1}^{n/2} [(1 - x_{2i-1})^2 + 10 \cdot (x_{2i} - x_{2i-1})^2]$	50
$f_5(x)$	$\sum_{i=1}^n x_i^2$	1000
$f_6(x)$	$\sum_{i=2}^n ((x_i + x_{i-1})^2 + 5(x_i - x_{i-1})^2)$	1000
$f_7(x)$	$x^T A x$	10000
$f_8(x)$	$e^{x_i} - 2x_i$	10000
$f_9(x)$	$A \cdot n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - A \cdot \cos(2\pi x_i))$	10000

4.1 Αριθμητικές εφαρμογές προβλημάτων χαμηλής διάστασης

Ξεκινάμε παραθέτοντας την συνάρτηση του Rosenbrock για δύο μεταβλητές ή αλλιώς "banana function", η οποία χρησιμοποιείται σε πολλά παραδείγματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, καθώς είναι κυρτή συνάρτηση και συμπεριφέρεται άρτια στους αλγόριθμους βελτιστοποίησης. Η συνάρτηση Rosenbrock γράφεται ως εξής:

$$f_1(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$



Σχήμα 4.1: Rosenbrock Function Plots

Η συνάρτηση έχει ελάχιστη τιμή 0 στο σημείο $x = [1, 1]^T$. Ξεκινάμε με χρήση της μεθόδου Newton για αρχικό σημείο $x_0 = [1.2, 1]^T$, ενώ χρησιμοποιούμε ως σημείο διακοπής του αλγορίθμου την τιμή $tol = 10^{-5}$ για την τιμή της νόρμας $\|\nabla f\|$.

Iteration	x_1	x_2	$f(x)$	$\ \nabla f\ $
1	1.2000	1.0000	19.4000	229.1693
2	1.1978	1.4346	0.0391	0.3979
3	1.0002	0.9614	0.1523	17.4567
4	1.0002	1.0004	0.0000	0.0004
5	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
6	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000

Πίνακας 4.1: Εξέλιξη της μεθόδου Newton

Παρατηρούμε ότι η μέθοδος έφτασε στο ολικό ελάχιστο της συνάρτησης σε μόλις 6 επαναλήψεις, πράγμα το οποίο περιμέναμε καθώς η επιλογή του αρχικού σημείου ήταν καλή προσέγγιση της ολικής λύσης και γνωρίζουμε ότι η μέθοδος Newton,

παρέχει ταχεία σύγκλιση για κυρτές συναρτήσεις και μάλιστα τετραγωνική.

Προχωράμε με τη χρήση της μεθόδου Steepest Descent, μέσω Line Search για την ίδια συνάρτηση και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω.

Iteration	x_1	x_2	$f(x)$	$\ \nabla f\ $
1	1.2000	1.0000	19.4000	229.1693
2	0.9934	1.0859	0.9836	44.1287
3	1.0704	1.0472	0.9743	46.6520
4	1.0290	1.0664	0.0064	3.3727
5	1.0320	1.0650	0.0010	0.0901
6	1.0318	1.0650	0.0010	0.0948
7	1.0320	1.0649	0.0010	0.0998
8	1.0318	1.0649	0.0010	0.1050
9	1.0319	1.0648	0.0010	0.1107
10	1.0317	1.0648	0.0010	0.1166
11	1.0319	1.0647	0.0010	0.1229
12	1.0317	1.0647	0.0010	0.1295
13	1.0319	1.0646	0.0010	0.1366
14	1.0316	1.0646	0.0010	0.1441
15	1.0318	1.0645	0.0010	0.1520
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
724	1.0079	1.0159	0.0001	0.0109
725	1.0079	1.0159	0.0001	0.0107
726	1.0079	1.0159	0.0001	0.0106
727	1.0079	1.0159	0.0001	0.0105
728	1.0079	1.0159	0.0001	0.0104
729	1.0079	1.0159	0.0001	0.0103

Πίνακας 4.2: Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent

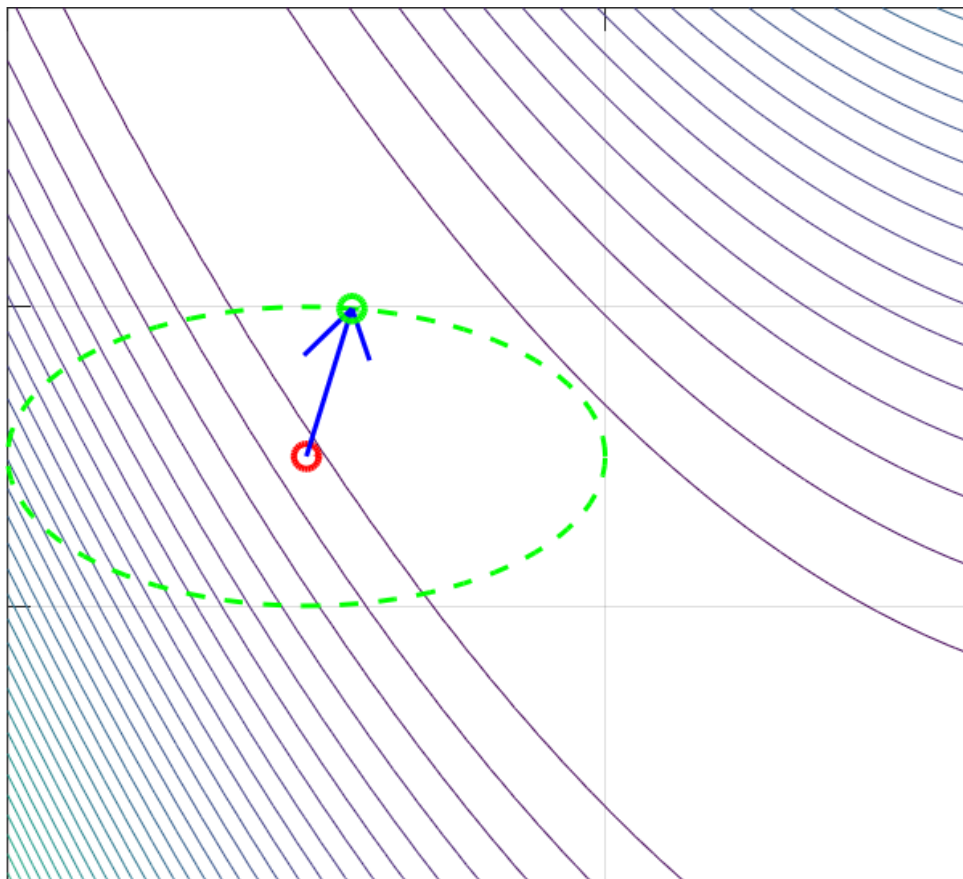
Εδώ σε αντίθεση με τη μέθοδο Newton, χρειαστήκαμε περίπου 729 επαναλήψεις για να ξεπεράσουμε το όριο ανοχής του αλγόριθμου, $tol = 10^{-2}$, ενώ ο αλγόριθμος δεν φτάνει στην ακριβή λύση $x = [1, 1]^T$, αλλά σε προσέγγιση τριών δεκαδικών σημείων, πράγμα που επιβεβαιώνει ότι η μέθοδος Steepest descent, ενώ παρέχει σύγκλιση, είναι αργή σε σχέση με την μέθοδο Newton ακόμα και για καλή επιλογή αρχικού σημείου.

Έπειτα, έγινε χρήση της μεθόδου Dogleg για την συνάρτηση Rosenbrock, με όριο ανοχής $tol = 10^{-5}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 2$, $\Delta_0 = 0.5$ και αρχικό σημείο $x_0 = [0.5, 0.8]^T$, ενώ τα αποτελέσματα παρετίθονται παρακάτω.

Iteration	x_1	x_2	$f(x)$	$\ \nabla f(x)\ $
1	0.5000	0.8000	156.2722	30.5000
2	0.8551	0.4481	111.9769	8.0429
3	0.8577	0.7356	0.2825	0.0203
4	0.8577	0.7356	0.2825	0.0203
5	0.8577	0.7356	0.2825	0.0203
6	0.9208	0.8435	1.7279	0.0083
7	0.9627	0.9251	0.6962	0.0017
8	0.9903	0.9800	0.3209	0.0002
9	0.9987	0.9974	0.0293	0.0000
10	1.0000	1.0000	0.0007	0.0000

Πίνακας 4.3: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_1(x)$

Παρατηρούμε ότι η μέθοδος Dogleg, χρειάστηκε 10 επαναλήψεις για να προσεγγίσει το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης, περισσότερες επαναλήψεις σε σχέση με την μέθοδο Newton, βελτιωμένη όμως η ταχύτητα σύγκλισης έναντι της κατεύθυνσης Steepest Descent.



Σχήμα 4.2: Η σφαιρική περιοχή αξιοπιστίας (Trust Region) και η πρώτη επανάληψη Dogleg

Στην παραπάνω εικόνα οπτικοποιείται η σφαίρα Trust Region για επιλογή ακτίνας $\Delta = 0.3$, καθώς και το βήμα που εκτελεί η μέθοδος Dogleg στην πρώτη

επανάληψη του αλγόριθμου για την συνάρτηση Rosenbrock. Παρατηρούμε ότι το βήμα φτάνει στα όρια της σφαίρας, πράγμα που σημαίνει ότι οι συναρτήσεις f και $m(p)$ έρχονται σε συμφωνία και έγινε βέλτιστη επιλογή βήματος.

Τέλος παραθέτουμε την εξέλιξη του αλγόριθμου CG Steihaug για την $f_1(x)$, με αρχικά δεδομένα : $x_0 = [1.2, 1]^T$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 3$, $\Delta_0 = 0.5$.

Iteration	x_1	x_2	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	1.2000	1.0000	19.4000	229.1693	0.5000
2	1.1978	1.4346	0.0391	0.3979	0.5000
3	1.1978	1.4346	0.0391	0.3979	1.0000
4	1.1978	1.4346	0.0391	0.3979	0.7500
5	1.1978	1.4346	0.0391	0.3979	0.5625
6	1.1685	1.3652	0.0284	0.4099	0.4219
7	1.1685	1.3652	0.0284	0.4099	0.8438
8	1.1685	1.3652	0.0284	0.4099	0.6328
9	1.1685	1.3652	0.0284	0.4099	0.4746
10	1.1475	1.3169	0.0218	0.2206	0.3560
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
31	0.8833	0.7416	0.1628	15.4796	0.4059
32	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.8118
33	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.6089
34	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.4567
35	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.3425
36	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.2569
37	0.8967	0.8039	0.0107	0.1469	0.1927
38	0.8970	0.8040	0.0106	0.1377	0.3853
39	0.9879	0.9676	0.0070	3.6336	0.3853
40	0.9924	0.9849	0.0001	0.0080	0.7706
41	1.0000	0.9999	0.0000	0.0253	1.5412

Πίνακας 4.4: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την $f_1(x)$

Method	Iter	$f(x^*)$	$\ \nabla f(x^*)\ $
Newton	6	0.0000	0.0000
Steepest Descent	729	0.0001	0.0103
Dogleg	10	0.0007	0.0000
CG Steihaug	41	0.0000	0.0253

Πίνακας 4.5: Σύγκριση της απόδοσης των αλγορίθμων για την $f_1(x)$

- Προχωράμε τώρα στο δεύτερο παράδειγμα που εφαρμόσαμε τους παραπάνω αλγόριθμους και αυτή τη φορά για μια συνάρτηση η οποία δεν έχει την ιδιότητα της κυρτότητας και συγκεκριμένα την:

$$f_2(x) = \sin(x_1) + (x_2 - x_1)^2.$$

Αρχικά για να βρούμε το ελάχιστο της συνάρτησης και το σημείο ελαχίστου χρησιμοποιούμε την συνάρτηση "fminunc" στο Matlab, η οποία χρησιμοποιεί τεχνικές Quasi Newton ώστε να βρεί το βέλτιστο x και παίρνουμε: $x_{sol} = [-1.5708, -1.5708]'$, ενώ η $min f_2(x) = -1$.

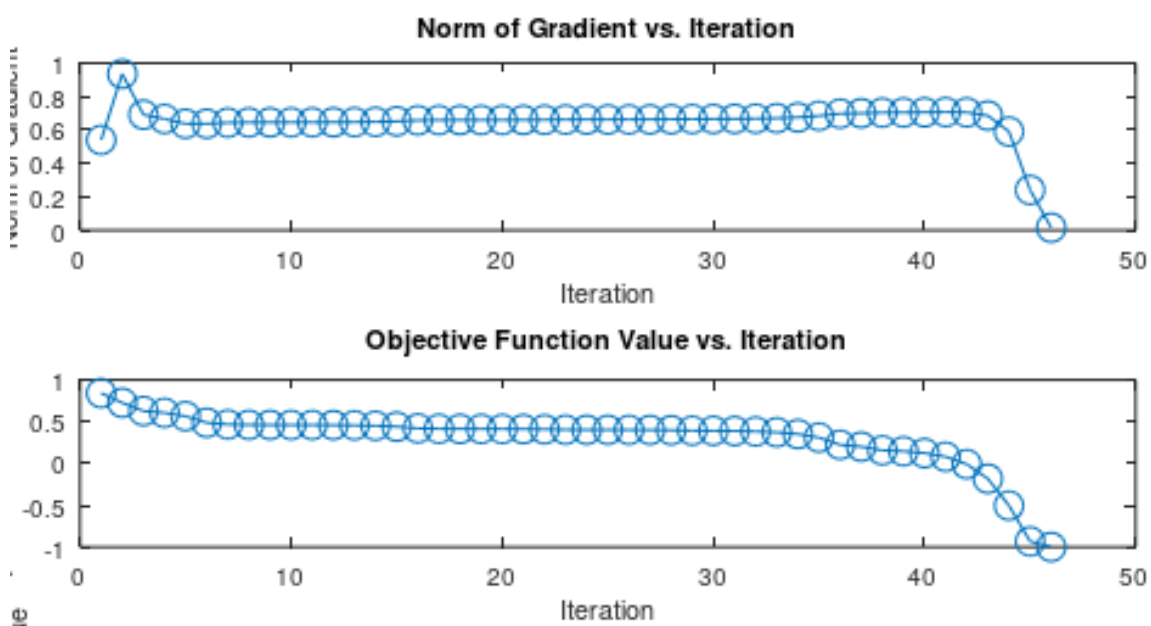
Έπειτα θα τρέξουμε τον αλγόριθμο για την μέθοδο Dogleg για την συνάρτηση f_2 με $x_0 = [1, 1]^T$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 2$, $\Delta_0 = 0.5$ και παραθέτουμε τα αποτελέσματα στον παρακάτω πίνακα.

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f(x)\ $	x_1	x_2	δ
1	0.841471	0.540302	1.000000	1.000000	0.500000
2	0.726163	0.935496	0.533631	1.000000	0.500000
3	0.536155	0.786635	0.564796	0.594988	0.500000
4	0.306652	0.980821	0.066271	0.556607	0.500000
5	0.057506	1.000054	0.057537	0.056683	1.000000
6	-0.176683	1.034054	-0.455489	0.057559	1.000000
7	-0.772299	0.560247	-0.884893	-0.845554	1.000000
8	-0.997347	0.155557	-1.596424	-1.548207	1.000000
9	-1.000000	0.000006	-1.570791	-1.570791	1.000000
10	-1.000000	0.000000	-1.570796	-1.570796	1.000000

Πίνακας 4.6: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_2(x)$

Χρειάστηκε λοιπόν 10 επαναλήψεις ώστε να φτάσει στην ελάχιστη τιμή της συνάρτησης με ακρίβεια. Όπως αναφέραμε και στο κεφάλαιο 3, η μέθοδος Dogleg, παρέχει ταχεία σύγκλιση για συναρτήσεις με θετικά ορισμένο εσσιανό πίνακα, διαφορετικά κάνει χρήση του σημείου Cauchy ως επιλεγμένο βήμα.

Στο παρακάτω γράφημα παρουσιάζεται η εξέλιξη των τιμών $\|\nabla f_2\|$ και $f_2(x)$ αντίστοιχα, με την χρήση της μεθόδου Dogleg.



Σχήμα 4.3: Γράφημα εξέλιξης των τιμών για $f_2(x)$, $\|\nabla f_2\|$

Εν συνεχεία θα κάνουμε χρήση του αλγόριθμου CG Steihaug για την $f_2(x)$, με $x_0 = [0.2, 0]^T$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 3$, $\Delta_0 = 0.6$ και παραθέτουμε τα αποτελέσματα στον παρακάτω πίνακα.

Iteration	$\ \nabla f\ $	$f(x)$	δ
1	1.4369	0.2387	0.6000
2	0.8433	-0.1009	0.6000
3	1.1156	-0.3538	0.6000
4	0.6927	-0.5567	0.6000
5	0.7712	-0.6946	0.6000
6	0.5046	-0.7932	0.6000
7	0.5221	-0.8598	0.6000
8	0.3506	-0.9056	0.6000
9	0.3513	-0.9365	0.6000
10	0.0162	-0.9999	0.6000
11	0.0000	-1.0000	0.6000

Πίνακας 4.7: Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την $f_2(x)$

Παρατηρούμε παρόμοια συμπεριφορά με τις υπόλοιπες μεθόδους, υπήρξε σύγκλιση στο εύρος 11 επαναλήψεων, με καλύτερη αρχική επιλογή αρχικού σημείου x_0 και παρατηρούμε ότι η ακτίνα παραμένει σταθερή, πράγμα που υποδηλώνει ότι ένα ενδιαμέσο βήμα πάρθηκε σε κάθε επανάληψη.

Με την χρήση της μεθόδου Newton για το συγκεκριμένο πρόβλημα, έπειτα από τρεις επαναλήψεις βρέθηκε ως βέλτιστο σημείο το $x = [1.5708, 1.5708]^T$ και η τιμή της συνάρτησης ίση με $f_2(x) = 1$, επομένως γίνεται αντιληπτό ότι για μη κυρτές συναρτήσεις, η χρήση του αλγόριθμου της μεθόδου Newton μπορεί να μας οδηγήσει σε λάθος πληροφορίες, το επιλεγμένο βήμα να μην είναι κατεύθυνση καθόδου, όπως και στην περίπτωση μας και η λύση να είναι σαγματικό σημείο.

Τέλος έγινε χρήση της μεθόδου Steepest Descent μέσω Backtracking Line Search για $x_0 = [1, 1]^T$, $tol = 10^{-2}$, $a = 1$, $\rho = 0.5$, $c = 10^{-4}$ και τα αποτελέσματα φαίνονται παρακάτω.

Iteration	x_1	x_2	$f_2(x)$	$\ \nabla f_2\ $
1	1.0000	1.0000	0.8415	0.5403
2	0.4597	1.0000	0.7356	1.0962
3	0.5519	0.4597	0.5328	1.0522
4	0.0339	0.5519	0.3022	1.0366
5	0.0522	0.0339	0.0525	1.0358
6	-0.4654	0.0522	-0.1809	1.0448
7	-0.3946	-0.4654	-0.3795	1.0740
8	-0.9270	-0.3946	-0.5164	1.1615
9	-0.6948	-0.9270	-0.5863	1.3172
10	-1.3111	-0.6948	-0.5866	1.5720
11	-1.0671	-1.0029	-0.8717	0.3768
12	-1.4214	-1.1313	-0.9047	0.7228
13	-1.3136	-1.2763	-0.9657	0.1948
14	-1.4935	-1.3508	-0.9766	0.3534
15	-1.4415	-1.4222	-0.9913	0.0983
16	-1.5318	-1.4608	-0.9942	0.1757
17	-1.5060	-1.4963	-0.9978	0.0493
18	-1.5513	-1.5158	-0.9985	0.0877
19	-1.5384	-1.5335	-0.9995	0.0246
20	-1.5610	-1.5433	-0.9996	0.0438
21	-1.5546	-1.5522	-0.9999	0.0123
22	-1.5659	-1.5570	-0.9999	0.0219
23	-1.5627	-1.5615	-1.0000	0.0062

Πίνακας 4.8: Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent για την $f_2(x)$

Παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος αποδίδει εξίσου καλά και με ελάχιστα μεγαλύτερη ακρίβεια σε λιγότερες επαναλήψεις, απ'ότι η μέθοδος Dogleg, ενώ κυμάνθηκε στο ίδιο εύρος επαναλήψεων με τον αλγόριθμο του Steihaug.

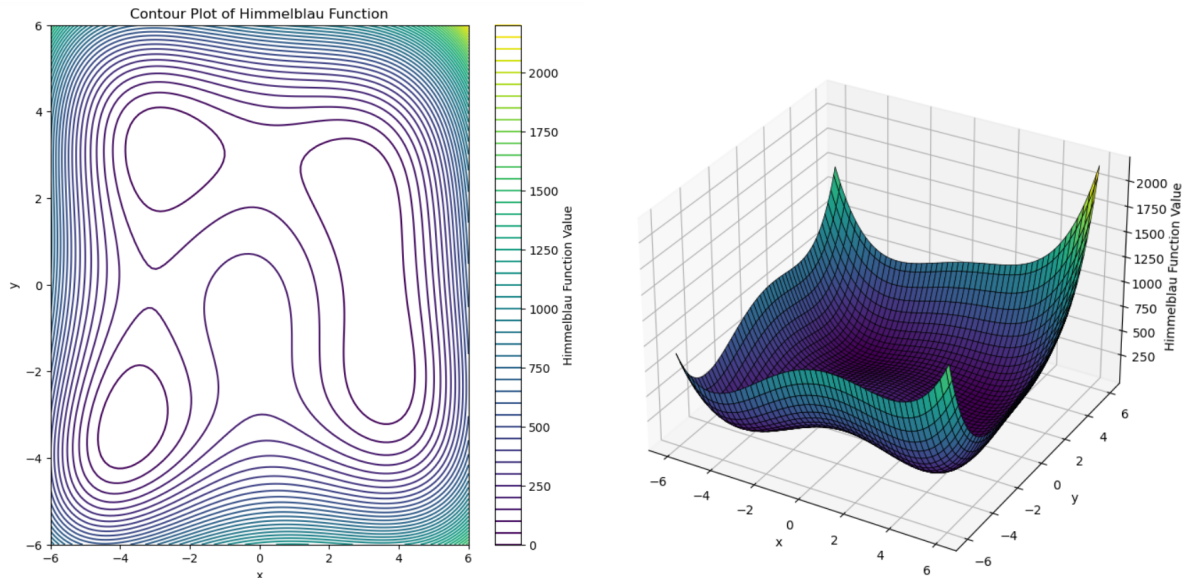
Method	Iter	$f(x^*)$	$\ \nabla f(x^*)\ $
Steepest Descent	23	-1.0000	0.0062
Dogleg	10	-1.0000	0.0000
CG Steihaug	11	-1.0000	0.0000

Πίνακας 4.9: Σύγκριση της απόδοσης των αλγορίθμων για την $f_2(x)$

- Στη συνέχεια των αριθμητικών εφαρμογών παραθέτουμε την συνάρτηση

$$f_3(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2,$$

γνωστή και ως συνάρτηση Himmelblau. Θα ελέγξουμε την συμπεριφορά της συνάρτησης Himmelblau για τους αλγόριθμους Dogleg, CG Steihaug με χρήση τεχνικών Trust Region.



Σχήμα 4.4: Himmelblau Function Plots

Για την μέθοδο Dogleg χρησιμοποιήθηκαν οι εξής αρχικές συνθήκες:

$$x_0 = [1, 1]^T, tol = 10^{-5}, \eta = 0.15, \Delta^{\max} = 2, \Delta_0 = 0.5$$

Για την μέθοδο CG Steihaug χρησιμοποιήθηκαν οι εξής αρχικές συνθήκες:

$$x_0 = [2, 2]^T, tol = 10^{-3}, \eta = 0.15, \Delta^{\max} = 3, \Delta_0 = 2$$

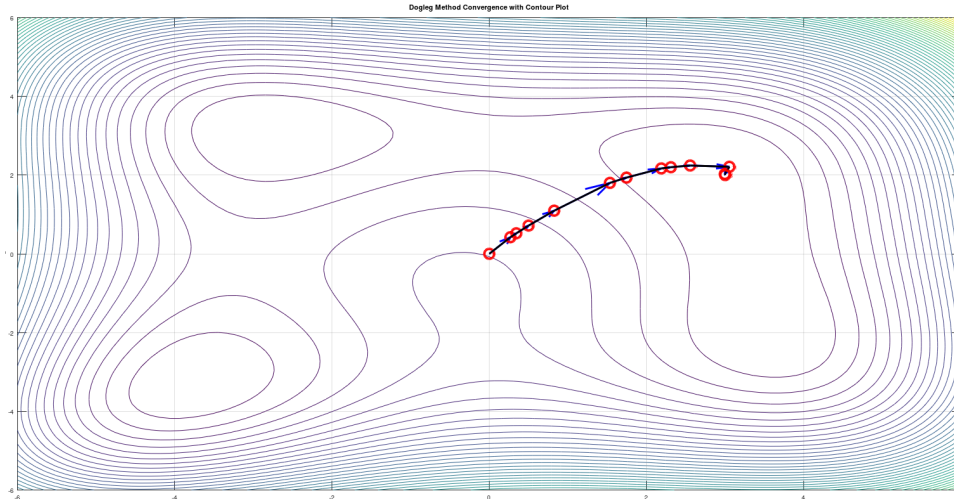
Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στους παρακάτω πίνακες:

Iteration	$f(x)$	$\ g\ $	δ
1	26.0000	45.6946	2.0000
2	26.0000	45.6946	1.5000
3	25.9071	45.6375	1.5000
4	25.8163	45.5814	1.5000
5	25.7276	45.5264	1.5000
6	25.6410	45.4725	1.5000
7	25.5563	45.4196	1.5000
8	25.4737	45.3679	1.5000
9	25.3929	45.3171	1.5000
10	25.3140	45.2674	1.5000
⋮	⋮	⋮	⋮
90	18.1829	40.0139	1.1250
91	18.0878	39.9318	1.1250
92	17.9965	39.8527	1.1250
93	17.9088	39.7764	1.1250
94	17.8254	39.7035	1.1250
95	17.7472	39.6350	1.1250
96	17.6740	39.5705	1.1250
97	17.6054	39.5098	1.1250
98	17.5411	39.4529	1.1250
99	17.4531	39.3746	1.1250
100	8.6338	39.2255	1.1250
101	0.1794	4.5164	1.1250
102	0.0006	0.1918	1.1250

Πίνακας 4.10: Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την συνάρτηση Himmelblau

Iteration	x_1	x_2	$\ \nabla f\ $	$f(x)$
1	1.0000	1.0000	59.6657	106.0000
2	1.3855	1.3184	62.2178	75.2739
3	2.2015	1.8965	43.6129	19.5666
4	2.2015	1.8965	43.6129	19.5666
5	3.1161	2.3008	21.5087	3.0091
6	2.9961	2.0528	1.9448	0.0450
7	2.9995	2.0021	0.0623	0.0001
8	3.0000	2.0000	0.0001	0.0000

Πίνακας 4.11: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για τη συνάρτηση Himmelblau



Σχήμα 4.5: Η διαδρομή του αλγόριθμου Dogleg για τη συνάρτηση Himmelblau

Στην παραπάνω εικόνα παρουσιάζεται η οπτικοποίηση της διαδρομής της μεθόδου Dogleg του παραδείγματός μας για τη συνάρτηση Himmelblau, για επιλογή αρχικού σημείου $x_0 = [0, 0]^T$ και με κόκκινο χρώμα αναπαρίσταται η πρόοδος της κάθε επανάληψης του αλγόριθμου.

Όσον αφορά τον αλγόριθμο του Steihaug για την συνάρτηση Himmelblau, η f έρχεται σε σύγκλιση σε 102 επαναλήψεις με σχετική ακρίβεια και για καλή εκτιμηση αρχικού σημείου x_0 καθώς και ακτίνας δ .

Ο αλγόριθμος Dogleg ήρθε σε σύγκλιση σε μόλις 8 επαναλήψεις με απόλυτη ακρίβεια και λιγότερο καλή αρχική εκτιμηση σημείου x_0 .

Τέλος κάνουμε χρήση και της μεθόδου Steepest Descent μέσω τεχνικών backtracking line search για την συνάρτηση Himmelblau με αρχικές τιμές:

$$x_0 = [2, 2]^T, tol = 10^{-2}, a = 1, \rho = 0.5, c = 10^{-4}$$

και τα αποτελέσματα φαίνονται παρακάτω:

Iteration	x_1	x_2	$f(x)$	$\ \nabla f\ $
1	2.0000	2.0000	26.0000	45.6946
2	3.3125	2.5625	14.7151	52.3835
3	2.6977	2.0222	2.9365	19.4605
4	2.9910	2.1023	0.1709	3.8154
5	2.9472	1.9914	0.1116	4.1949
6	3.0094	2.0123	0.0081	1.1220
7	2.9946	2.0028	0.0009	0.3408
8	3.0000	2.0030	0.0001	0.1151
9	2.9982	1.9998	0.0001	0.1427
10	3.0003	2.0005	0.0000	0.0413
11	2.9998	2.0001	0.0000	0.0126
12	3.0000	2.0001	0.0000	0.0044

Πίνακας 4.12: Εξέλιξη της μεθόδου Steepest Descent για την $f_3(x)$

Method	Iter	$f(x^*)$	$\ \nabla f(x^*)\ $
Steepest Descent	12	0.0000	0.0044
Dogleg	8	0.0000	0.0001
CG-Steihaug	102	0.0006	0.1918

Πίνακας 4.13: Σύγκριση των μεθόδων.

- Συνεχίζουμε την ανάλυση αριθμητικών εφαρμογών, παραθέτοντας ακόμα μια συνάρτηση και πιο συγκεκριμένα μια μορφή επέκτασης της κλασσικής συνάρτησης του Rosenbrock η οποία μπορεί να γραφεί ως:

$$f_4(x) = \sum_{i=1}^{n/2} [(1 - x_{2i-1})^2 + 10 \cdot (x_{2i} - x_{2i-1}^2)^2].$$

Πιο συγκεκριμένα θα κάνουμε χρήση των αλγόριθμων Dogleg κι CG Steihaug για διάσταση $n=50$ μεταβλητές.

Για τον αλγόριθμο Dogleg, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τις: $x_0 = 0.8 \cdot \text{ones}(50, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 5$, $\Delta_0 = 0.3$

Για τον αλγόριθμο CG Steihaug, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τις: $x_0 = 0.8 \cdot \text{ones}(50, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 3$, $\Delta_0 = 3$

Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στους παρακάτω πίνακες:

Iteration	$\ \nabla f\ $	f
1	31.9024	7.4000
2	10.0295	1.0358
3	2.1003	0.4259
4	0.7096	0.3970
5	2.1959	0.3914
6	0.6704	0.3607
7	2.0573	0.3549
8	0.6336	0.3282
9	1.9416	0.3225
10	0.5994	0.2988
⋮	⋮	⋮
80	0.1107	0.0133
81	0.3325	0.0128
82	0.1058	0.0121
83	0.3177	0.0117
84	0.1011	0.0111
85	0.3035	0.0107
86	0.0965	0.0102
87	0.2900	0.0098
88	0.0922	0.0093
89	0.2771	0.0089
90	0.3781	0.0024
91	0.0381	0.0003
92	0.0065	0.0000
93	0.0002	0.0000
94	0.0000	0.0000

Πίνακας 4.14: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg της συνάρτησης $f_4(x)$ για $n = 50$

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	7.4000	31.9024	3.0000
2	1.2590	12.1142	3.0000
3	0.4084	0.9419	3.0000
4	0.3999	1.1441	3.0000
5	0.3888	0.7587	3.0000
6	0.3814	1.5560	3.0000
7	0.3646	0.6836	3.0000
8	0.3582	1.9268	3.0000
9	0.3344	0.6408	3.0000
10	0.3286	1.9637	3.0000
⋮	⋮	⋮	⋮
128	0.0463	0.0024	0.2253
129	0.1394	0.0023	0.2253
130	0.1394	0.0023	0.1689
131	0.0442	0.0022	0.1689
132	0.1332	0.0021	0.1689
133	0.0422	0.0020	0.1689
134	0.1272	0.0019	0.1689
135	0.0403	0.0018	0.1689
136	0.1215	0.0018	0.1689
137	0.1098	0.0011	0.1267
138	0.0233	0.0001	0.1267

Πίνακας 4.15: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG Steihaug για $n=50$

Και οι δύο μέθοδοι χρειάστηκαν σχετικά μεγάλο εύρος επαναλήψεων για να φτάσουν το όριο ανοχής του αλγόριθμου ενώ απο τις πρώτες επαναλήψεις είχαν προσεγγίσει την ελάχιστη τιμή της συνάρτησης.

4.2 Προβλήματα μεγάλης διάστασης

Προχωρώντας στα επόμενα παραδείγματα των αριθμητικών εφαρμογών, πιο συγκεκριμένα για συναρτήσεις μεγάλης κλίμακας, με $n \geq 1000$ στα οποία όπως αναφέραμε, ενδέχεται να προκύψουν δυσκολίες λόγω της διάστασης του προβλήματος. Συγκεκριμένα τα εμπόδια που κληθήκαμε να προσπεράσουμε είναι ο ορίσμος της συνάρτησης και των παραγώγων στο περιβάλλον του Matlab, καθώς και οι υπολογιστικοί πόροι που απαιτούνται απο τις πράξεις όπως ο υπολογισμός αναστρόφου εσσιανού πίνακα.

- Η πρώτη συνάρτηση που μελετήθηκε είναι μια απλή μορφή τετραγωνική συνάρτησης και μπορεί να γραφεί ως:

$$f_5(x) = \sum_{i=1}^n x^2.$$

Η συνάρτηση έχει τις ιδιότητες κυρτότητας καθώς έχει θετικά ορισμένο εσσιανό πίνακα, άρα περιμένουμε ο αλγόριθμος της μεθόδου Dogleg, να αποδίδει άρτια.

Ως αρχικές συνθήκες χρησιμοποιήθηκαν οι: $x_0 = 0.4 \cdot \text{ones}(1000, 1)$, $\text{tol} = 10^{-5}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 2$, $\Delta_0 = 0.5$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω:

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	160.000000	25.298221	0.300000
2	152.500534	24.698221	0.600000
3	138.041601	23.498221	1.200000
4	111.283735	21.098221	2.000000
5	73.087293	17.098221	2.000000
6	42.890850	13.098221	2.000000
7	20.694408	9.098221	2.000000
8	6.497965	5.098221	2.000000
9	0.301522	1.098221	2.000000
10	0.000000	0.000000	2.000000

Πίνακας 4.16: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την συνάρτηση $f_5(x)$

Παρατηρώντας τα αποτελέσματα, βλέπουμε ότι το ελάχιστο της συνάρτησης βρέθηκε σε 10 επαναλήψεις και μάλιστα με ακρίβεια, επομένως για τις επιλεγμένες αρχικές επιλογές του αλγόριθμου, υπήρξε ταχεία σύγκλιση καθώς και ο χρόνος μεταξύ των επαναλήψεων ήταν μικρός. Συνεπώς η μέθοδος Dogleg με τη χρήση τεχνικών Trust Region μπορεί να αποδώσει πολύ καλά ακόμα και για προβλήματα μεγάλης διάστασης, αρκεί να είναι λογικές οι αρχικές επιλογές για κυρτές συναρτήσεις.

Στη συνέχεια θα κάνουμε χρήση του αλγόριθμου CG-Steihaug για την ίδια συνάρτηση. Ως αρχικές συνθήκες των παρακάτω αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκαν οι: $x_0 = 0.1 \cdot \text{ones}(1000, 1)$, $\text{tol} = 10^{-1}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 0.5$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω:

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	10.0000	6.3246	0.5000
2	9.9979	6.3239	1.0000
3	9.9952	6.3230	2.0000
4	9.9933	6.3224	4.0000
5	0.0000	0.0000	8.0000
6	0.0000	0.0000	4.0000

Πίνακας 4.17: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG Steihaug για την $f_3(x)$

Η συνάρτηση ήρθε σε σύγκλιση στο εύρος έξι επαναλήψεων και αυτό μπορεί να αποδοθεί, στην επιλογή αρχικού σημείου και στην κυρτότητα της συνάρτησης, χρειάστηκε δηλαδή να τρέξουμε τον αλγόριθμο για διάφορες αρχικές τιμές ακτίνας δ και αρχικού σημείου x_0 , ώστε να φτάσουμε στην βέλτιστη επιλογή ως προς τη σύγκλιση.

- Παραθέτουμε ένα ακόμη παράδειγμα, μιας πιο σύνθετης συνάρτησης αθροίσματος η οποία έχει επίσης θετική δεύτερη παράγωγο και άρα είναι κυρτή. Η συνάρτηση

είναι η:

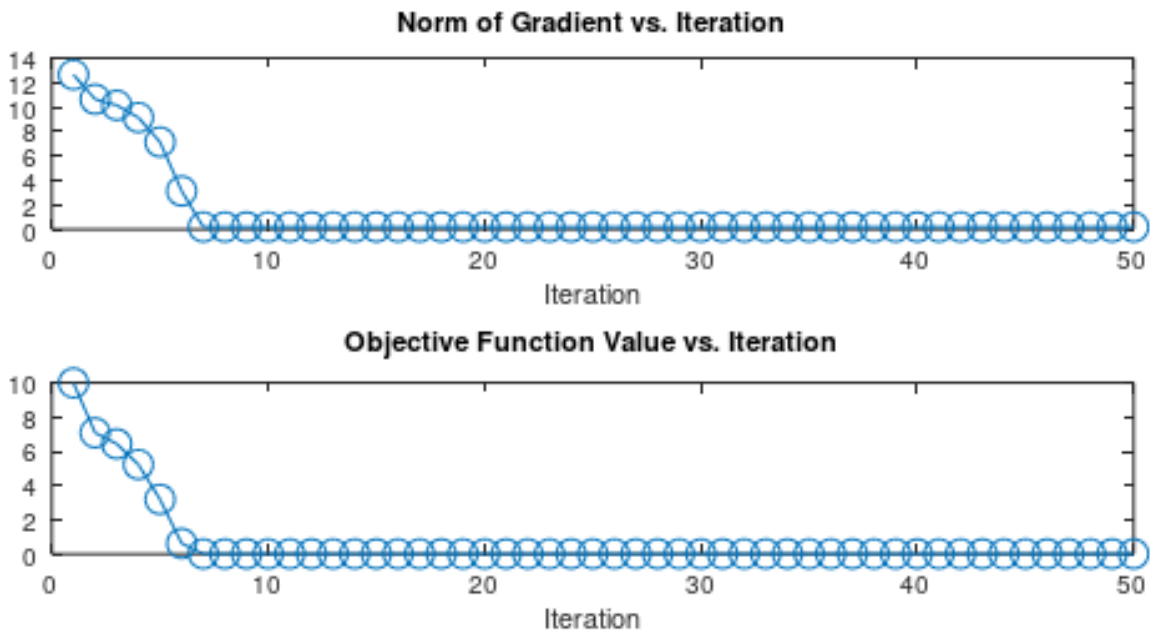
$$f_6(x) = \sum_{i=2}^n ((x_i + x_{i-1})^2 + 5(x_i - x_{i-1})^2).$$

Ως αρχικές συνθήκες των παρακάτω αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκαν οι: $x_0 = 0.2 \cdot \text{ones}(1000, 1)$, $tol = 10^{-1}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 2$, $\Delta_0 = 0.2$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω:

Iteration	$\ \nabla f\ $	f
1	50.5585	159.8400
2	48.9571	149.8883
3	48.5568	147.4504
4	47.7562	142.6347
5	46.1550	133.2431
6	42.9528	115.4202
7	36.5494	83.6151
8	34.9487	76.4641
9	31.7476	63.1223
10	25.3462	40.2801
11	12.5533	9.9652
12	0.7838	0.1751
13	0.7838	0.1751
14	0.7838	0.1751
15	0.7838	0.1751

Πίνακας 4.18: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_6(x)$

Παρατηρούμε ότι στις 12 πρώτες επαναλήψεις η μέθοδος έχει προσεγγίσει ικανοποιητικά το ελάχιστο της συνάρτησης, όμως στις επόμενες επαναλήψεις η τιμή της συνάρτησης f και της ∇f παραμένουν σταθερές και δε σημειώνουν κάποια πρόοδο, πράγμα που ενδεχομένως οφείλεται στις αρχικές συνθήκες και στην δομή των μεθόδων Trust Region (το βήμα ενδεχομένως αποτυγχάνει να επιφέρει μείωση και επομένως για την επανάληψη $k + 1$, έχουμε το σημείο $x_{k+1} = x_k$), πράγμα το οποίο μπορεί να φανεί πιο εύκολα στο παρακάτω γράφημα.



Σχήμα 4.6: Γράφημα εξέλιξης των τιμών για $f_6(x)$, $\|\nabla f_6\|$

Τώρα θα κάνουμε χρήση του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_6(x)$, συγκεκριμένα με αρχικές συνθήκες $x_0 = 0.15 \cdot \text{ones}(1000, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 5$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω:

Iteration	$f(x)$	$\ g\ $	δ
1	89.9100	37.9189	5.0000
2	0.0485	0.8423	3.7500
3	0.0124	0.5181	2.8125
4	0.0031	0.2141	2.1094
5	0.0008	0.1313	1.5820
6	0.0002	0.0549	1.1865
7	0.0001	0.0330	0.8899
8	0.0000	0.0148	0.6674

Πίνακας 4.19: Εξέλιξη της μεθόδου CG-Steihaug για την $f_6(x)$

Όπως παρατηρούμε ο αλγόριθμος ήρθε σε σύγκλιση σε πολύ μικρό εύρος επαναλήψεων και αυτό οφείλεται αρχικά στην κυρτότητα της συνάρτησης, ενώ πολύ σημαντικό ρόλο έπαιξε η επιλογή αρχικού σημείου σχετικά κοντά στην λύση της συνάρτησης (Για διαφορετικές επιλογές αρχικού σημείου, ο αλγόριθμος θα χρειαζόταν εκατοντάδες επαναλήψεις ώστε να έρθει σε σύγκλιση).

- Συνεχίζουμε με την συνάρτηση $f_7(x) = x^T A x$, όπου είναι μια πιο σύνθετη τετραγωνική μορφή με τον πίνακα A να είναι συμμετρικός πίνακας τύπου toeplitz με τιμές εκθετικά μειωμένες δηλαδή σε κώδικα Matlab:

$$A = \text{toeplitz}(\exp(-1:n)).$$

Εφαρμόσαμε τις μεθόδους Dogleg και CG Steihaug και τα αποτελέσματα φαίνονται παρακάτω:

Iter	$f(x)$	$\ \nabla f(x)\ $	δ
1	497.503896	19.900322	0.500000
2	477.802580	19.502308	1.000000
3	439.593991	18.706281	2.000000
4	367.952974	17.114228	4.000000
5	243.775565	13.930127	5.000000
6	124.374872	9.950018	5.000000
7	44.775124	5.969945	2.500000
8	19.900427	3.979941	5.000000
9	0.000666	0.017120	2.500000
10	0.000000	0.000000	1.250000

Πίνακας 4.20: εξέλιξη της μεθόδου dogleg για $f_7(x)$ με $n=10000$

Ο αλγόριθμος της μεθόδου Dogleg εδώ ήταν αρκετά αποδοτικός το ολικό ελάχιστο βρέθηκε σε 10 μόλις επαναλήψεις με ακρίβεια με αρχικές συνθήκες $x_0 = 0.25 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 5$, $\Delta_0 = 0.5$, ενώ παρατηρήθηκε μειωμένη ταχύτητα μεταξύ των επαναλήψεων όπως περιμέναμε

Iteration	$f(x)$	$\ g\ $	δ
1	3.1840	1.5920	0.3000
2	3.1838	1.5920	0.6000
3	3.1834	1.5919	1.2000
4	3.1832	1.5918	2.4000
5	0.0000	0.0000	4.8000

Πίνακας 4.21: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_7(x)$

Για την συνάρτηση $f_7(x)$ και τον αλγόριθμο Steihaug, χρειάστηκε να προσεγγίσουμε αρκετά το βέλτιστο σημείο στην αρχική επανάληψη $x_0 = 0.02 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 0.3$, ώστε να έρθει σύγκλιση σε μικρό εύρος επαναλήψεων ενώ για πιο τυχαίες επιλογές αρχικού σημείου ο αλγόριθμος, αν και παρείχε συνεχή μείωση της τιμής της συνάρτησης, η σύγκλιση θα χρειαζόταν πολύ μεγάλο αριθμο επαναλήψεων.

• Προχωράμε σε ένα ακόμη παράδειγμα διάστασης $n=10000$ και πιο συγκεκριμένα για τη συνάρτηση $f_8(x) = e^{x_i} - 2x_i$. Εφαρμόσαμε την μέθοδο Dogleg με τεχνικές Trust Region για αρχικές συνθήκες: $x_0 = 0.6 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-2}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 0.5$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα:

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	11982.532725	113.031958	0.500000
2	11926.186502	112.357653	0.250000
3	11898.138320	112.028871	0.500000
4	11842.286303	111.383242	0.250000
5	11814.480064	111.067589	0.500000
6	11759.102419	110.446481	1.000000
7	11649.264729	109.241379	2.000000
8	11433.108855	106.954754	4.000000
9	11013.955850	102.729346	2.000000
10	10810.477119	100.764019	4.000000
11	10415.156867	96.937335	2.000000
12	10223.151115	95.073940	4.000000
13	9850.318084	91.356899	2.000000
14	9669.456508	89.505862	4.000000
15	9318.915298	85.765235	8.000000
16	8663.557845	78.049533	4.000000
17	8359.299816	74.065465	2.000000
18	8213.198986	72.031152	1.000000
19	8141.681670	71.002346	2.000000
20	8001.757989	68.916602	4.000000
21	7734.630324	64.626741	8.000000
22	7253.644623	55.525630	4.000000
23	7041.114776	50.710582	8.000000
24	6676.155718	40.400473	10.000000
25	6342.655014	26.052938	5.000000
26	6231.909221	18.160504	10.000000
27	6137.446024	1.227705	5.000000
28	6137.056932	0.046716	2.500000

Πίνακας 4.22: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την $f_5(x)$

Παρατηρούμε ότι και σε αυτή την περίπτωση συνάρτησης η σύγκλιση έρχεται σε λίγες σχετικά επαναλήψεις. Ο αλγόριθμος αποδίδει σωστά και εδώ λόγω κυρτότητας της συνάρτησης, ενώ παρατηρήθηκε ότι ο χρόνος μεταξύ των επαναλήψεων ήταν αρκετά μεγαλύτερος από ότι σε προβλήματα χαμηλής διάστασης.

Θα κάνουμε χρήση του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_4(x)$, συγκεκριμένα με αρχικές συνθήκες $x_0 = 0.3 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-4}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 5$ και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω:

Iteration	$\ g\ $	$f(x)$	δ
1	65.0141	7498.5881	0.5000
2	13.1687	6182.4121	0.4000
3	3.0645	6139.4285	0.3200
4	1.1241	6137.3735	0.2560
5	0.5511	6137.1324	0.2048
6	0.3259	6137.0830	0.1638
7	0.0003	6137.0564	0.1311

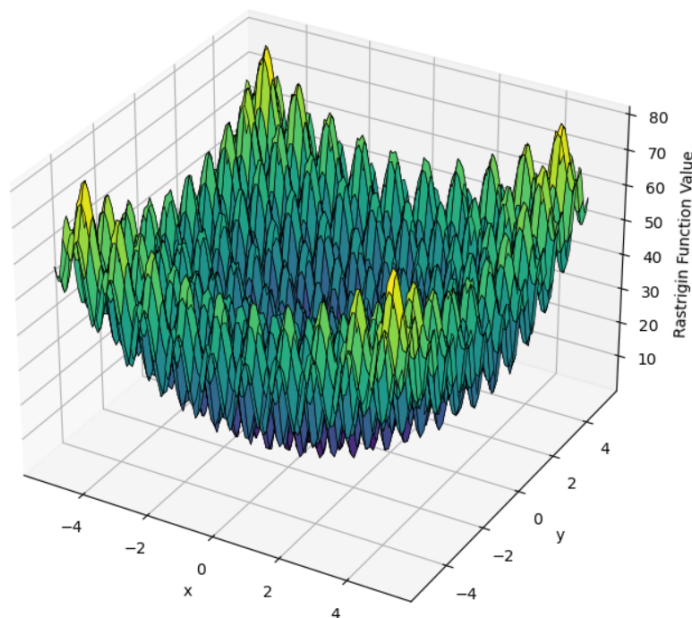
Πίνακας 4.23: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση $f_5(x)$

Βλέπουμε και εδώ σύγκλιση σε μικρό εύρος επαναλήψεων, ενώ παρατηρήθηκε αρκετά βελτιωμένη ταχύτητα μεταξύ των επαναλήψεων.

- Θα κλείσουμε τα αριθμητικά παραδείγματα με την συνάρτηση

$$f_9(x) = A \cdot n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - A \cdot \cos(2\pi x_i)),$$

με $A = 10$ η οποία είναι γνωστή ως συνάρτηση Rastrigin και χρησιμοποιείται επίσης σε πολλά προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η συνάρτηση Rastrigin είναι κυρτή και παρουσιάζει ελάχιστο για $x = [0, 0, \dots, 0]^T$ με την συνάρτηση να λαμβάνει την τιμή 0.



Σχήμα 4.7: 3D plot της συνάρτησης Rastrigin

Παρακάτω φαίνεται η εξέλιξη των αλγόριθμων Dogleg και CG Steihaug για την συνάρτηση Rastrigin:

Για τον αλγόριθμο Dogleg, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τις: $x_0 = 0.3 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-5}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 2$, $\Delta_0 = 0.5$

Για τον αλγόριθμο CG-Steihaug, χρησιμοποιήσαμε ως αρχικές συνθήκες τις: $x_0 = 0.05 \cdot \text{ones}(10000, 1)$, $tol = 10^{-4}$, $\eta = 0.15$, $\Delta^{\max} = 10$, $\Delta_0 = 1$

Iteration	$f(x)$	$\ \nabla f\ $	δ
1	69498.3006	6015.6643	0.5000
2	66506.4580	5950.7282	1.0000
3	60627.4609	5803.4224	2.0000
4	49368.1084	5441.2017	2.0000
5	38919.5446	4993.6904	2.0000
6	29445.5719	4467.8829	2.0000
7	21094.7488	3872.0086	2.0000
8	13998.0473	3215.4015	2.0000
9	8266.7874	2508.3538	2.0000
10	3990.8814	1761.9528	2.0000
11	1237.4159	987.9067	2.0000
12	49.5940	198.3596	2.0000
13	0.0000	0.06497	1.5000
14	0.0000	0.0000	1.1250

Πίνακας 4.24: Εξέλιξη της μεθόδου Dogleg για την συνάρτηση rastrigin, $n = 10000$

Ο αλγόριθμος της μεθόδου Dogleg ήταν αρκετά αποδοτικός στην ελαχιστοποίηση της συνάρτησης και βρέθηκε σε σύγκλιση σε 14 επαναλήψεις με ακρίβεια, με μόνο μειονέκτημα τον χρόνο μεταξύ των επαναλήψεων ο οποίος κρίθηκε σχετικά μεγάλος.

Iteration	$\ \nabla f\ $	$f(x)$	δ
1	4919.3484	1951.6110	1.0000
2	4670.7053	1902.8495	0.9900
3	4436.6733	1855.6636	0.9801
4	4216.3088	1810.0008	0.9703
5	4008.7325	1765.8094	0.9606
6	3813.1249	1723.0393	0.9510
7	3628.7225	1681.6417	0.9415
8	3454.8138	1641.5690	0.9321
9	3290.7355	1602.7754	0.9227
10	3135.8693	1565.2160	0.9135
⋮	⋮	⋮	⋮
145	106.9903	14.4257	0.2352
146	104.1944	13.6815	0.2329
147	101.4988	12.9827	0.2305
148	98.8992	12.3262	0.2282
149	96.3915	11.7090	0.2259
150	93.9718	11.1284	0.2237
151	91.6364	10.5822	0.2215
152	89.3818	10.0678	0.2192
153	87.2047	9.5833	0.2170
154	85.1018	9.1267	0.2149
155	0.0051	0.0000	0.2127

Πίνακας 4.25: Εξέλιξη του αλγόριθμου CG-Steihaug για την συνάρτηση rastrigin

Εδώ μπορούμε να σημειώσουμε ότι αν και χρειάστηκαν 155 επαναλήψεις με τα αρχικά δεδομένα που δώσαμε στον αλγόριθμο, η ταχύτητα μεταξύ των επαναλήψεων βρέθηκε αρκετά βελτιωμένη σε σύγκριση με αυτή του αλγόριθμου Dogleg. Ο αλγόριθμος του CG-Steihaug πλεονεκτεί σε παραδείγματα μεγάλης κλίμακας λόγω την υπολογιστικής του ταχύτητας.

Function	$f(x^*)$	$Iter_{NM}$	$Iter_{SD}$	$Iter_{DL}$	$Iter_{CG}$
$f_1(x)$	0.0000	6	729	10	41
$f_2(x)$	-1.0000	-	23	10	11
$f_3(x)$	0.0000	-	12	8	102
$f_4(x)$	0.0000	-	-	94	138
$f_5(x)$	0.0000	-	-	10	6
$f_6(x)$	0.0000	-	-	15	8
$f_7(x)$	0.0000	-	-	10	5
$f_8(x)$	6137.0564	-	-	28	7
$f_9(x)$	0.0000	-	-	14	155

Πίνακας 4.26: Επίδοση των αλγόριθμων βάσει επαναλήψεων

Οι περισσότερες συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν ως Test functions είναι ευρέως γνωστές συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται σε προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς και μπορούν να βρεθούν στο [βλ. [1]], ενώ κάποιες άλλες επιλέχθηκαν αυθαίρετα.

Σύνοψη

Μέσα απο αυτή την διπλωματική εργασία, παρουσιάστηκαν οι τεχνικές τύπου Trust Region για βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς. Η βασική μορφή του αλγόριθμου Trust Region παρουσιάστηκε στο Κεφάλαιο 3 και αργότερα στο ίδιο κεφάλαιο αναπτύχθηκαν τεχνικές επίλυσης του υπο προβλήματος μιας επανάληψης, πιο συγκεκριμένα οι μέθοδοι Dogleg, Two Dimensional Subspace και CG Steihaug, καθώς μελετήθηκαν και οι ιδιότητες σύγκλισης των παραπάνω αλγορίθμων. Αποδείχθηκε ότι αν κάποια μέθοδος παρέχει τουλάχιστον ίδια μείωση με αυτή του σημείου Cauchy, αρκεί για σύγκλιση του αλγόριθμου, ενώ οι μέθοδοι επίλυσης του υπο προβλήματος για την περίπτωση που $B_k = \nabla^2 f_k$, η σύγκλιση είναι υπεργραμμική υπο προϋποθέσεις. Στο Κεφάλαιο 2 ορίσαμε το γενικό πρόβλημα βελτιστοποίησης και παραθέσαμε μια κατηγορία μεθόδων επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, αυτή των τεχνικών τύπου Line search, ενώ παρουσιάστηκε μια βασική δομή των μεθόδων Quasi Newton και Conjugate Gradient. Προχωρήσαμε σε αριθμητικές εφαρμογές για συναρτήσεις όπως αυτή του Rosenbrock χαμηλής διάστασης και συγκρίναμε τους περισσότερους αλγόριθμους που παραθέσαμε, σε ταχύτητα και σύγκλιση. Τέλος προχωρήσαμε σε αριθμητικά παραδείγματα μεγάλης διάστασης μεταξύ των μεθόδων Dogleg και CG Steihaug για τεχνικές τύπου Trust Region και ελέγξαμε τις ιδιότητες των 2 αλγορίθμων σε υπολογιστική ταχύτητα και σφάλμα σύγκλισης για κυρτές συναρτήσεις διάστασης έως $n = 10000$. Για τα προβλήματα χαμηλής διάστασης οι μέθοδοι κινήθηκαν σε κοντινό εύρος επαναλήψεων, ενώ για κυρτές συναρτήσεις οι αλγόριθμοι Dogleg, CG Steihaug και Newton φάνηκαν προτιμότεροι ενάντι τεχνικών Line Search με κατεύθυνση Steepest Descent, με την μέθοδο Newton να μην μπορεί να εφαρμοστεί σε μη κυρτά προβλήματα. Όσον αφορά τα προβλήματα υψηλής κλίμακας για κυρτές συναρτήσεις και οι 2 αλγόριθμοι παρείχαν ικανοποιητική μείωση, αλλά ο αλγόριθμος του Steihaug αντιμετώπιζε αρκετά καλύτερα τα προβλήματα σε υπολογιστική ταχύτητα μεταξύ των επαναλήψεων, όμως χρειάστηκε καλύτερες αρχικές εκτιμήσεις απο ότι η μέθοδος Dogleg.

Παράρτημα

Στο παράρτημα αυτό της διπλωματικής εργασίας, παραθέτουμε τους κώδικες που τρέξαμε στο περιβάλλον του matlab και παρουσιάσαμε τα αριθμητικά παραδείγματα στο Κεφάλαιο 4 της εργασίας. Οι κώδικες των αλγορίθμων μπορούν να τροποποιηθούν, για παράδειγμα η επιλογή των αρχικών παραμέτρων μπορεί να αλλάξει, ενώ μπορεί να τροποποιηθεί και η μείωση της ακτίνας Trust Region αν κάποιο βήμα δεν επιφέρει την επιθυμητή μείωση. Ξεκινάμε με τη μέθοδο Dogleg για τεχνικές Trust Region:

```
function dogleg_method
    x=[1.2,1]'; %initial x_0 guess
    tol = 1e-5; % tolerance
    eta = 0.15;
    deltamax = 2; %max_radius
    del = 0.5; %radius
    iter_values = zeros(1, 500);
    norm_g_values = zeros(1, 500);
    obj_values = zeros(1, 500);
    x1_values = zeros(1, 500);
    x2_values = zeros(1, 500);

    for k=1:500
        obj = fs(x);
        g = gs(x);
        h = hs(x);
        pk=dogleg_step(x,g,h,del);
        m=fs(x)+gs(x)*pk + 0.5*pk'*hs(x)*pk;
        rho=(fs(x)-fs(x+pk))/(-gs(x)*pk - 0.5*pk'*hs(x)*pk);
        iter_values(k) = k;
        norm_g_values(k) = norm(g);
        obj_values(k) = obj;
        x1_values(k) = x(1);
        x2_values(k) = x(2);
        fprintf('Iteration %d: f(x) = %f, norm(grad) = %f,
        x1 = %f, x2 = %f, del = %f\n', k,
        obj, norm(g), x(1), x(2), del);
```

```

    if rho<=0.25
        del=0.5*del;
    elseif rho>=0.75 && norm(pk)==del
        del=min(2*del ,deltamax);
    else
        del=0.75*del;
    end
    if rho>eta
        x=x+pk;
    else
        x=x;
    end
    if norm(gs(x)) < tol
        disp('Converged!');
        break;
    end
end
% Display final results
fprintf('Final Results:\n');
fprintf('Iteration: %d\n', k);
fprintf('Optimal x: [%f, %f]\n', x(1), x(2));
fprintf('Objective value at x: %f\n', obj);
fprintf('Norm of gradient at x: %f\n', norm(g));

for idx = 1:k
    fprintf('%d & %0.4f & %0.4f & %0.4f & %0.4f\n',
        iter_values(idx), x1_values(idx),
        x2_values(idx), norm_g_values(idx), obj_values(idx));
end

end

```

```

function pk= dogleg_step(x,g,h,del)
if (g' * h * g) <= 0
    tau = 1;
else
    tau = min((norm(g)^3) / (del * (g' * h * g)), 1);
end

pc = -tau * del * (g / norm(g));

if min(eig(h)) <= 0
    pk = pc;
else
    pn = -inv(h) * g;

    if norm(pc) >= del
        pk = -del * g / norm(g);
    elseif norm(pn) <= del
        pk = pn;
    else
        b = pc' * (pc - pn);
        c = norm(pc - pn)^2;
        d = del^2 - norm(pc)^2;
        a1 = (b + sqrt(b^2 + c * d)) / c;
        a2 = (b - sqrt(b^2 + c * d)) / c;

        if a1 >= 0
            a = a1;
        else
            a = a2;
        end

        pk = pc + a * (pn - pc);
    end
end
end
end

```

Προχωράμε με την μέθοδο Steepest Descent, με τη χρήση Backtracking Line Search που ορίσαμε στο Κεφάλαιο 2.

```

function steepest_descent_backtracking
x = [2; 2]; % Initial guess
tol = 1e-2;
alpha_bar = 1;
rho = 0.5;
c = 1e-4; % Adjusted c value

```

```

himmelblau = @(x) (x(1)^2 + x(2) - 11)^2 +
(x(1) + x(2)^2 - 7)^2;

gradhimmelblau = @(x) [2 * (x(1)^2 + x(2) - 11)
* 2 * x(1) + 2 * (x(1) + x(2)^2 - 7);
2 * (x(1)^2 + x(2) - 11) +
2 * (x(1) + x(2)^2 - 7) * 2 * x(2)];

iteration_values = zeros(1, 40);
x_values = zeros(2, 40);
obj_values = zeros(1, 40);
norm_g_values = zeros(1, 40);

for k = 1:50
    obj = himmelblau(x);
    g = gradhimmelblau(x);
    pk = -g; % Steepest descent direction

    fprintf('Iteration %d: f(x) = %f, norm(grad) = %f,
alpha_bar = %f, rho = %f, c = %f\n', k, obj, norm(g),
alpha_bar, rho, c);
    % Backtracking line search
    if k <= 20
        iteration_values(k) = k;
        x_values(:, k) = x;
        obj_values(k) = obj;
        norm_g_values(k) = norm(g);
    end
    [alpha, x] = backtracking_line_search(himmelblau, g,
x, pk, alpha_bar, rho, c, tol);

    fprintf(' Backtracking: alpha = %f\n', alpha);

    if norm(g) < tol
        disp('Converged!');
        break;
    end
end
% Display final results
disp('Final Results:');
disp(['Iteration: ' num2str(k)]);
disp(['Optimal x: ' num2str(x')]);
disp(['Objective value at x: ' num2str(obj)]);

```

```

disp(['Norm of gradient at x: ' num2str(norm(g))]);
end

```

```

function [alpha, x] = backtracking_line_search(obj_func,
grad, x, pk, alpha_bar, rho, c, tol)
alpha = alpha_bar;

while obj_func(x + alpha * pk) > obj_func(x) +
c * alpha * grad' * pk
    alpha = rho * alpha;
end

% Update x with the new step
x = x + alpha*pk;
end

```

Εν συνεχεία παραθέτουμε τον αλγόριθμο του CG Steihaug που κατασκευάσαμε στο περιβάλλον του Matlab καθώς και την απλή μορφή της μεθόδου του Newton:

```

function trustregioncgsteihaug
x = 0.3*ones(10000,1);
tol = 1e-4; % Adjusted for consistency
eta = 0.15;
deltamax = 10;
del = 0.5;
iter_values = [];
norm_g_values = [];
obj_values = [];

fprintf('Iteration & %\|g\| & f(x) &
%\log(f(x))\ \\\n');

for k = 1:50
    obj = func7(x);
    g = gradfunc7(x);
    h = hessfunc7(x);
    pk = cgSteihaug(x, g, h, tol, del);
    m = func7(x) + gradfunc7(x)' * pk
    + 0.5 * pk' * hessfunc7(x) * pk;
    rho = (func7(x) - func7(x + pk)) / (-gradfunc7(x)'
    * pk - 0.5 * pk' * hessfunc7(x) * pk);

    iter_values = [iter_values, k];
    norm_g_values = [norm_g_values, norm(g)];

```

```

obj_values = [obj_values , obj];

fprintf('%d & %.4f & %.4f & %.4f \\\n', k,
norm(g), obj);
fprintf('Diagnostic Info: rho = %.4f,
del = %.4f\n', rho, del);

if rho <= 0.25
    del = 0.75 * del;
elseif rho >= 0.75 && norm(pk) == del
    del = min(2 * del, deltamax);
else
    del = 0.8*del;
end

if rho > eta
    x = x + pk;
else
    x = x;
end

if norm(gradfunc7(x)) < tol
    disp('Converged!');
    break;
end
end
end
end

```

```

function pk = cgSteihaug(x, g, h, tol, del)

% Initialization
z0 = zeros(size(g)); % z0
r0 = g; % r0
d0 = -r0; % d0

% Check for convergence
if norm(r0) < tol
    pk = z0;
    return;
end

for j = 0:50
    % Check for negative curvature
    if d0' * h*d0 <= 0
        % Find  $\tau$  that  $pk = z_j + \tau d_j$  minimizes  $mk(pk)$ 

```



```

        and satisfies  $\|pk\| = \text{del}$ 
        % we use line search to find tau
        options = optimset('Display', 'off');
        tau = fminbnd(@(tau) func7(x + tau * d0), 0,
            del, options);
        pk = z0 + tau * d0;
        return;
    end

    % Compute step length  $\alpha_j$ 
    alpha_j = (r0' * r0) / (d0' * h*d0);

    % Update  $z_{j+1}$ 
    zj_plus_1 = z0 + alpha_j * d0;

    % Check for trust region constraint
    if norm(zj_plus_1) >= del
        % Find  $\tau$  that  $pk = z_j + \tau d_j$  satisfies
         $\|pk\| = \text{del}$ 
        options = optimset('Display', 'off');
        tau = fminbnd(@(tau) func7(x + tau * d0), 0,
            del, options);
        pk = z0 + tau * d0;
        return;
    end

    % Update  $r_{j+1}$ 
    rj_plus_1 = r0 + alpha_j * h*d0;

    % Check for convergence
    if norm(rj_plus_1) < tol
        pk = zj_plus_1;
        return;
    end

    % Compute  $\beta_{j+1}$ 
    beta_j_plus_1 = (rj_plus_1' * rj_plus_1) / (r0' * r0);

    % Update  $d_{j+1}$ 
    d0 = -rj_plus_1 + beta_j_plus_1 * d0;

    % Update variables for the next iteration
    z0 = zj_plus_1;
    r0 = rj_plus_1;
end
end

```

```

%function Newton's Method
x=[1.2,1]';
f=fs(x);
g=gs(x);
h=hs(x);
k=1;
iter_values = zeros(1, k);
x_values = zeros(2, k);
f_values = zeros(1, k);
norm_g_values = zeros(1, k);

fprintf('Iteration\t x\t\t\t f(x)\t\t\t norm(g)\n');
fprintf('%d\t\t[%0.4f, %0.4f]\t\t%0.4f\t\t%0.4f\n', k, x(1),
x(2), f, norm(g));

while norm(g)>10e-5
    X=-inv(h)*g;
    x=x+X;
    f=fs(x);
    g=gs(x);
    h=hs(x);
    k=k+1;
    fprintf('%d\t\t[%0.4f, %0.4f]\t\t%0.4f\t\t%0.4f\n', k, x(1),
x(2), f, norm(g));
    iter_values(k) = k;
    x_values(:, k) = x;
    f_values(k) = f;
    norm_g_values(k) = norm(g);
end

```

Και για το τέλος παραθέτουμε τους κώδικες για τα γραφήματα της διαδρομής dogleg της συνάρτησης Himmelblau και του βήματος Dogleg με τη σειρά.

```

function dogleg_method_plot
% Define Himmelblau function
f = @(x, y) (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2;

x_min = -6;
x_max = 6;
y_min = -6;
y_max = 6;
grid_points = 100;
x_vector = linspace(x_min, x_max, grid_points);
y_vector = linspace(y_min, y_max, grid_points);

```

```

[x_grid, y_grid] = meshgrid(x_vector, y_vector);
z_grid = zeros(size(x_grid));
for i = 1:size(x_grid, 1)
    for j = 1:size(x_grid, 2)
        z_grid(i, j) = f(x_grid(i, j), y_grid(i, j));
    end
end

figure;
contour(x_grid, y_grid, z_grid, 50);
hold on;

% Initialize dogleg method pars
x = [0, 0]';
tol = 1e-5;
eta = 0.15;
deltamax = 2;
del = 0.5;

iter_values = [];
norm_g_values = [];
obj_values = [];
x1_values = zeros(1, 500);
x2_values = zeros(1, 500);

for k = 1:100
    obj = himmelblau(x);
    g = gradhimmelblau(x);
    h = hesshimmelblau(x);
    pk = dogleg_step(x, g, h, del);
    m = himmelblau(x) + gradhimmelblau(x)' * pk +
        0.5 * pk' * hesshimmelblau(x) * pk;
    rho = (himmelblau(x) - himmelblau(x + pk)) /
        (-gradhimmelblau(x)' * pk -
        0.5 * pk' * hesshimmelblau(x) * pk);

    iter_values = [iter_values, k];
    norm_g_values = [norm_g_values, norm(g)];
    obj_values = [obj_values, obj];
    x1_values(k) = x(1);
    x2_values(k) = x(2);

    % Plot the vecotr for the current iteration
    plot(x(1), x(2), 'ro', 'MarkerSize', 8,

```

```

'LineWidth', 2);
text(x(1), x(2), sprintf(' %d', k), 'Color', 'r',
'FontSize', 8);

% Plot dogleg path
if k > 1
    plot([x1_values(k-1), x(1)],
[x2_values(k-1), x(2)], 'k-', 'LineWidth', 1.5);
end

% Plot a vector for the optimization step
quiver(x(1), x(2), pk(1), pk(2), 'b-',
'LineWidth', 1.5);

fprintf('Iteration %d: f(x) = %f, norm(grad) = %f,
x1 = %f, x2 = %f, del = %f\n', k, obj, norm(g),
x(1), x(2), del);
if rho <= 0.25
    del = 0.5 * del;
elseif rho >= 0.75 && norm(pk) == del
    del = min(2 * del, deltamax);
else
    del = 0.25 * del;
end
if rho > eta
    x = x + pk;
else
    x = x;
end
if norm(gradhimmelblau(x)) < tol
    disp('Converged!');
    break;
end

    pause(0.1);
end

hold off;
xlabel('x_1');
ylabel('x_2');
title('Dogleg Method Convergence with Contour Plot');
grid on;
end

```

```

function visualize_trust_region
% Define Rosenbrock function
f = @(x, y) (1 - x)^2 + 100 * (y - x^2)^2;

x_min = -2;
x_max = 2;
y_min = -1;
y_max = 3;
grid_points = 100;
x_vector = linspace(x_min, x_max, grid_points);
y_vector = linspace(y_min, y_max, grid_points);
[x_grid, y_grid] = meshgrid(x_vector, y_vector);
z_grid = zeros(size(x_grid));
for i = 1:size(x_grid, 1)
    for j = 1:size(x_grid, 2)
        z_grid(i, j) = f(x_grid(i, j), y_grid(i, j));
    end
end

figure;
contour(x_grid, y_grid, z_grid, 50);
hold on;

% Initial vector
x = [-1.5, 1.5]';

% Trust region radius
del = 0.5;

plot(x(1), x(2), 'ro', 'MarkerSize', 8, 'LineWidth', 2);
text(x(1), x(2), ' 1', 'Color', 'r', 'FontSize', 8);

% Plot trust region radius
drawTrustRegion(x, del);

xlim([x_min, x_max]);
ylim([y_min, y_max]);
title('Trust Region Visualization  
(Rosenbrock Function)', 'FontWeight', 'bold');
xlabel('X-coordinate');
ylabel('Y-coordinate');
grid on;

```

```
end

function drawTrustRegion(x, del)
    % Draw trust region boundary
    theta = linspace(0, 2*pi, 100);
    x_circle = x(1) + del * cos(theta);
    y_circle = x(2) + del * sin(theta);
    plot(x_circle, y_circle, 'g--', 'LineWidth', 1.5);
end
```

Βιβλιογραφία

- [1] Neculai Andrei. “Test functions for unconstrained optimization”. Στο: *Research Institute for informatics. Center for Advanced Modeling and Optimization* (2004), σσ. 8–10.
- [2] Neculai Andrei. “The Trust-Region Method”. Στο: *Modern Numerical Nonlinear Optimization*. Springer, 2022, σσ. 331–353.
- [3] Mary Branch, Thomas Coleman και Yuying li. “A Subspace, Interior, and Conjugate Gradient Method for Large-Scale Bound-Constrained Minimization Problems”. Στο: *SIAM Journal on Scientific Computing* 21 (Δεκ. 1999). doi: 10.1137/S1064827595289108.
- [4] Andrew R Conn, Nicholas IM Gould και Philippe L Toint. *Trust region methods*. SIAM, 2000.
- [5] Ron S Dembo και Trond Steihaug. “Truncated-Newton algorithms for large-scale unconstrained optimization”. Στο: *Mathematical Programming* 26.2 (1983), σσ. 190–212.
- [6] John E Dennis Jr και Robert B Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. SIAM, 1996.
- [7] Jennifer Erway, Philip Gill και Josh Griffin. “Iterative Methods for Finding a Trust-region Step”. Στο: *SIAM Journal on Optimization* 20 (Ιαν. 2009), σσ. 1110–1131. doi: 10.1137/070708494.
- [8] Roger Fletcher. *Practical methods of optimization*. John Wiley & Sons, 2000.
- [9] Poul Erik Frandsen κ.ά. “Unconstrained optimization”. Στο: (1999).
- [10] Luigi Grippo, Marco Sciandrone κ.ά. “Introduction to Methods for Nonlinear Optimization”. Στο: (2023).
- [11] Manolis Lourakis και Antonis Argyros. “Is Levenberg-Marquardt the Most Efficient Optimization Algorithm for Implementing Bundle Adjustment?.” Στο: τόμ. 2. Ιαν. 2005, σσ. 1526–1531. doi: 10.1109/ICCV.2005.128.
- [12] Jorge J Moré. “Recent developments in algorithms and software for trust region methods”. Στο: *Mathematical Programming The State of the Art: Bonn 1982* (1983), σσ. 258–287.
- [13] Jorge Nocedal και Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. 2η έκδοση. New York, NY, USA: Springer, 2006.
- [14] Elijah Polak. *Optimization: algorithms and consistent approximations*. Τόμ. 124. Springer Science & Business Media, 2012.

- [15] Michael JD Powell. “A new algorithm for unconstrained optimization”. Στο: *Nonlinear programming*. Elsevier, 1970, σσ. 31–65.
- [16] Mostafa Rezapour. “Trust-Region Methods for Unconstrained Optimization Problems”. PhD thesis. Washington State University, 2020.
- [17] Gerald A Shultz, Robert B Schnabel και Richard H Byrd. “A family of trust-region-based algorithms for unconstrained minimization with strong global convergence properties”. Στο: *SIAM Journal on Numerical analysis* 22.1 (1985), σσ. 47–67.
- [18] W Ye. “Trust-region methods”. Στο: (2014).
- [19] Ya-xiang Yuan. “A review of trust region algorithms for optimization”. Στο: *Iciam*. Τόμ. 99. 1. 2000, σσ. 271–282.