

Ονοματεπώνυμο: Δημήτρης Μάρκου

Εργασία Βελτιστοποίησης

Κριτήρια εύρεσης και αναγνώρισης τοπικών βελτιστοποιητών (ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης)

- Η εύρεση τοπικών βελτιστοποιητών πραγματοποιήθηκε με τρεις τρόπους
(Πρόσημα τετραγωνικών μορφών, Ελάσσονες υπό-ορίζουσες και με ιδιοτιμές).

Κορμός αλγόριθμου:

Αρχικά δηλώνεται η συνάρτηση f που θα χρησιμοποιηθεί και ένα vector x το οποίο περιέχει τις ανεξάρτητες μεταβλητές. Στην συνέχεια γίνεται συμβολικός υπολογισμός των δεύτερων παραγώγων της f ως προς κάθε ανεξάρτητη μεταβλητή με την εντολή `diff()` των οποίων τα αποτελέσματα αποθηκεύονται στον πίνακα `Gradf`.

Ακολουθεί ο υπολογισμός του Εσσιανού πίνακα, το οποίο πραγματοποιείται με την εντολή `hessian()` καθώς και ο υπολογισμός των κρίσιμων σημείων με την εντολή `solve()` στον πίνακα `Gradf`.

Πρόσημα τετραγωνικών μορφών:

Έπειτα ξεκινάει μια επανάληψη για όσες είναι οι γραμμές του πίνακα X (Πίνακας με τα κρίσιμα σημεία) δηλαδή για το πλήθος των κρίσιμων σημείων. Για κάθε ένα από αυτά τα σημεία γίνεται αντικατάσταση των τιμών του στον Εσσιανό πίνακα με χρήση της εντολής `subs()` και υπολογίζεται το quadratic form του σημείου αυτού.

Τέλος θέττοντας ότι οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι διάφορες του μηδενός και σύμφωνα με τα κριτήρια για τον χαρακτηρισμό των κρίσιμων σημείων με πρόσημα τετραγωνικών μορφών, εκτυπώνεται αν είναι τοπικός ελαχιστοποιητής/μεγιστοποιητής ή δεν είναι βελτιστοποιητής ή ο αλγόριθμος δεν μπορεί να το προσδιορίσει.

Κριτήριο αξιολόγηση κρίσιμων σημείων:

Θεώρημα 2.5 (Ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης)

Έστω μία πραγματική συνάρτηση n μεταβλητών $f : X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, η οποία είναι C^2 στο ανοικτό υποσύνολο X του \mathbb{R}^n και $\mathbf{x}^* \in X$ με $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Τότε, ισχύουν:

(1) Αν ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ είναι θετικά ορισμένος τότε το \mathbf{x}^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής της f .

(2) Αν ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ είναι αρνητικά ορισμένος τότε το \mathbf{x}^* είναι τοπικός μεγιστοποιητής της f .

(3) Αν ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ είναι αόριστος τότε το \mathbf{x}^* δεν είναι τοπικός βελτιστοποιητής της f .

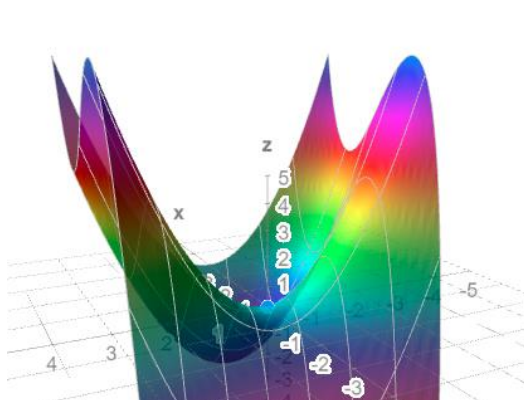
Παράδειγμα 1:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = x_1^3 - 3x_1^2 + x_2^2$

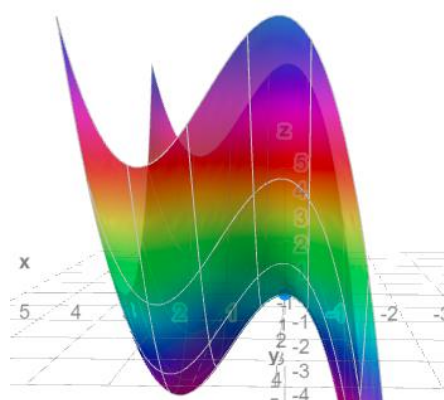
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0]$ και $[2,0]$ με

$Qf_{\text{star}}(0,0)(x_1, x_2) = 2x_2^2 - 6x_1^2 > 0$ και < 0 και

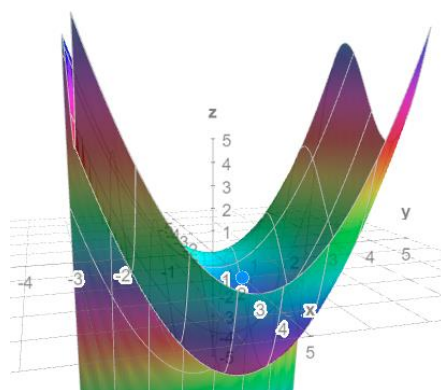
$Qf_{\text{star}}(2,0)(x_1, x_2) = 6x_1^2 + 2x_2^2 > 0$. Επομένως το $[0,0]$ δεν αποτελεί τοπικό βελτιστοποιητή (κανόνας 3) ενώ το $[2,0]$ είναι τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1) όπως φαίνεται και στην παρακάτω γραφική παράσταση.



Σημείο $[0,0]$ (1)



Σημείο $[0,0]$ (2)



Σημείο $[2,0]$

Παράδειγμα 2:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2, x_3) = x_1^3 + x_1 \cdot x_3^2 + 3 \cdot x_1^2 + x_2^2 + 2 \cdot x_3^2$

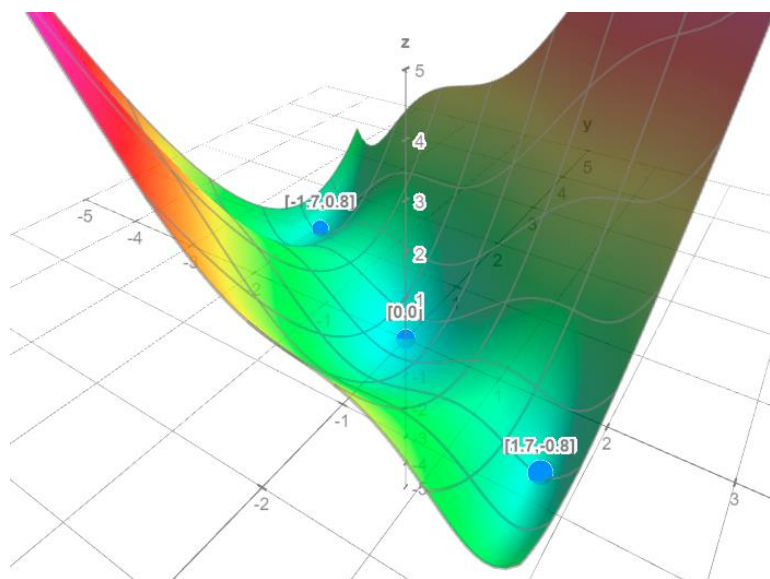
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0,0]$ και $[-2,0,0]$ με $Qf_star(0,0,0)(x_1, x_2, x_3) = 6 \cdot x_1^2 + 2 \cdot x_2^2 + 4 \cdot x_3^2 > 0$ και $Qf_star(-2,0,0)(x_1, x_2, x_3) = 2 \cdot x_2^2 - 6 \cdot x_1^2 > 0$ and < 0 . Επομένως το σημείο $[0,0,0]$ είναι τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1) ενώ το σημείο $[-2,0,0]$ δεν αποτελεί τοπικό βελτιστοποιητή (κανόνας 3).

Παράδειγμα 3:

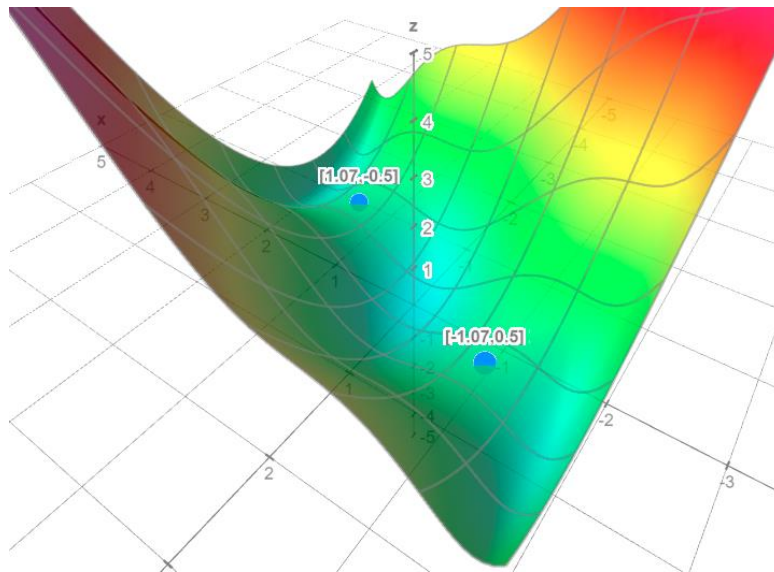
Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = 2 \cdot x_1^2 - 1.05 \cdot x_1^4 + x_1^6/6 + x_1 \cdot x_2 + x_2^2$

Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0]$, $[-1.07, 0.53]$, $[-1.74, 0.87]$, $[1.07, -0.53]$, και $[1.74, -0.87]$ με $Qf_star(0,0)(x_1, x_2) = 2 \cdot x_1 \cdot x_2 + 4 \cdot x_1^2 + 2 \cdot x_2^2 > 0$
 $Qf_star(-1.07, 0.53)(x_1, x_2) = 2.0 \cdot x_1 \cdot x_2 - 3.87 \cdot x_1^2 + 2.0 \cdot x_2^2 > 0$ και < 0
 $Qf_star(-1.74, 0.87)(x_1, x_2) = 2.0 \cdot x_1 \cdot x_2 + 12.15 \cdot x_1^2 + 2.0 \cdot x_2^2 > 0$
 $Qf_star(1.07, -0.53)(x_1, x_2) = 2.0 \cdot x_1 \cdot x_2 - 3.87 \cdot x_1^2 + 2.0 \cdot x_2^2 > 0$ και < 0
 $Qf_star(1.74, -0.87)(x_1, x_2) = 2.0 \cdot x_1 \cdot x_2 + 12.15 \cdot x_1^2 + 2.0 \cdot x_2^2 > 0$.

Επομένως τα σημεία $[0,0]$, $[-1.74, 0.87]$ και $[1.74, -0.87]$ είναι τοπικοί ελαχιστοποιητές (κανόνας 1) ενώ τα σημεία $[-1.07, 0.53]$ και $[1.07, -0.53]$ δεν αποτελούν τοπικούς βελτιστοποιητές (κανόνας 3) όπως φαίνεται και στην παρακάτω γραφική παράσταση.



Σημεία $[0,0]$, $[-1.74, 0.87]$ και $[1.74, -0.87]$



Σημεία [-1.07,0.53] και [1.07,0.53]

Ελάσσονες υπό-ορίζουσες:

Σε αυτήν την περίπτωση, πάλι αρχίζει μια επανάληψη για όσα είναι τα κρίσιμα σημεία. Για κάθε σημείο γίνεται αντικατάσταση των τιμών του στον Εσσιανό πίνακα και υπολογίζονται όλες οι ελάσσονες υπό-ορίζουσες με χρήση της εντολής `det()` οι οποίες αποθηκεύονται στον πίνακα `D_values`.

Τέλος σύμφωνα με τα κριτήρια για τον χαρακτηρισμό των κρίσιμων σημείων με ελάσσονες υπό-ορίζουσες, εκτυπώνεται αν είναι τοπικός ελαχιστοποιητής/μεγιστοποιητής ή δεν είναι βελτιστοποιητής ή ο αλγόριθμος δεν μπορεί να το προσδιορίσει.

Κριτήριο αξιολόγηση κρίσιμων σημείων:

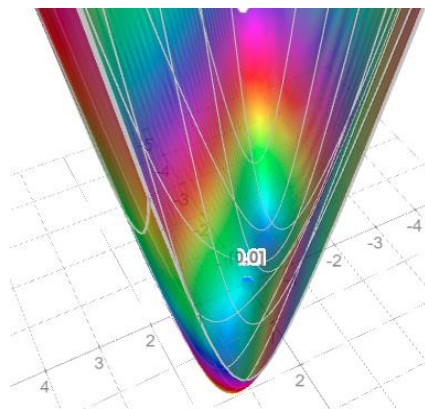
Θεώρημα 2.6 Έστω μία πραγματική συνάρτηση $f : X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ n μεταβλητών, η οποία είναι C^2 στο ανοικτό υποσύνολο X του \mathbb{R}^n και $\mathbf{x}^* \in X$ με $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ (κρίσιμο σημείο της f) και $\Delta_k = \Delta_k(\mathbf{x}^*)$, $k = 1, \dots, n$ οι πρωτεύουσες ελάσσονες ορίζουσες του $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$. Τότε, ισχύουν οι ισχυρισμοί:

- (1) Αν $\Delta_k > 0$ για κάθε $k = 1, \dots, n$ τότε το \mathbf{x}^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής της f .
- (2) Αν $(-1)^k \Delta_k > 0$ για κάθε $k = 1, \dots, n$, δηλαδή αν $\Delta_1 < 0$, $\Delta_2 > 0$, $\Delta_3 < 0$, $\Delta_4 > 0, \dots$ τότε το \mathbf{x}^* είναι τοπικός μεγιστοποιητής της f .
- (3) Αν $\Delta_k < 0$ για κάποιο k άρτιο με $k = 1, \dots, n$ τότε το \mathbf{x}^* δεν είναι τοπικός βελτιστοποιητής της f .
- (4) Αν $\Delta_k \neq 0$ για κάθε $k = 1, \dots, n$ και το σύνολο $\left\{ \Delta_1, \frac{\Delta_2}{\Delta_1}, \frac{\Delta_3}{\Delta_2}, \dots, \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}} \right\}$ περιέχει θετικά και αρνητικά στοιχεία τότε το \mathbf{x}^* δεν είναι τοπικός βελτιστοποιητής της f .

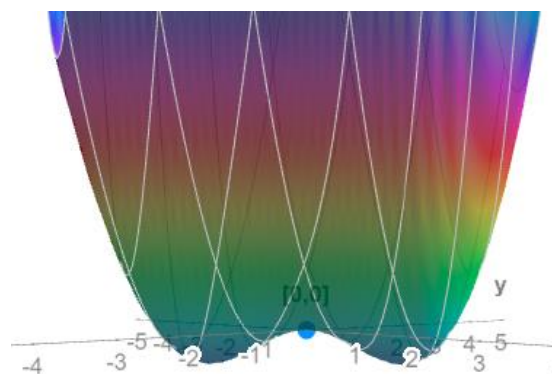
Παράδειγμα 1:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_1^2 - 6x_1x_2 + 3x_2^2$

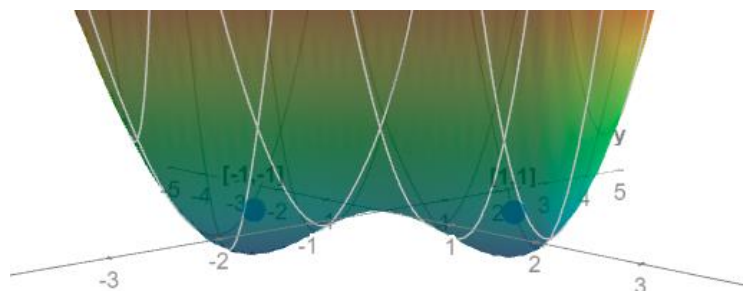
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0]$, $[1,1]$ και $[-1,-1]$ με ελάχιστονες ορίζουσες $(2, -24)$, $(14, 48)$ και $(14, 48)$ αντίστοιχα. Επομένως το σημείο $[0,0]$ δεν αποτελεί **τοπικό ελαχιστοποιητή (κανόνας 3)**, το σημείο $[1,1]$ είναι **τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1)** και το σημείο $[-1,-1]$ είναι **τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1)** όπως φαίνεται και στην παρακάτω γραφική παράσταση.



Σημείο $[0,0]$ (1)



Σημείο $[0,0]$ (2)

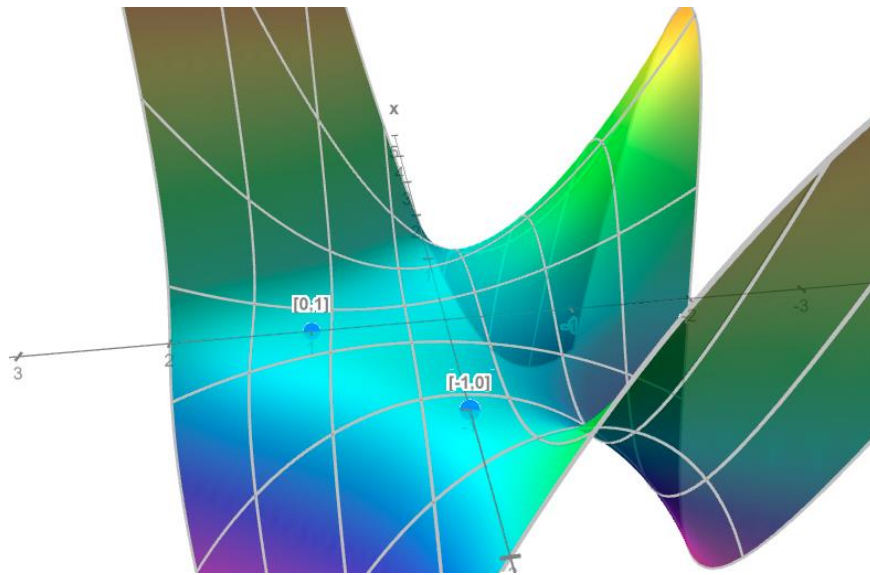


Σημεία $[-1,-1]$ και $[1,1]$

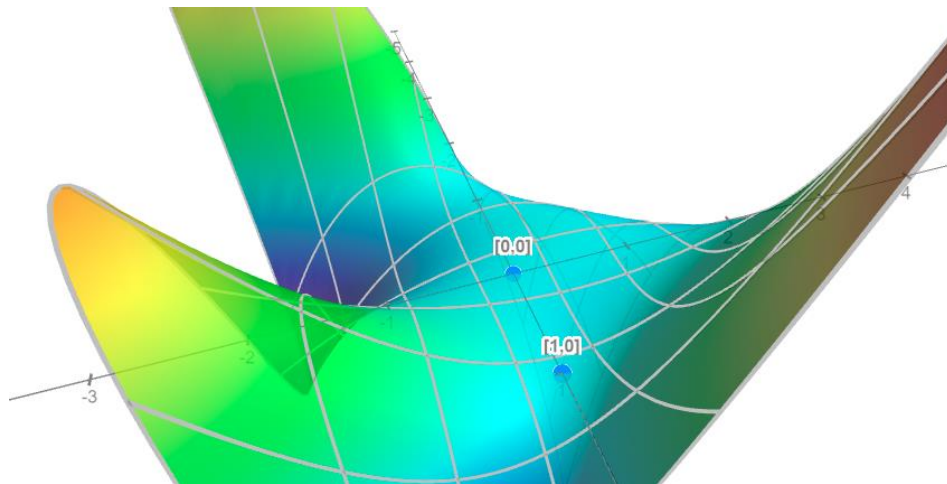
Παράδειγμα 2:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = x_1x_2^2 + x_1^3x_2 - x_1x_2$

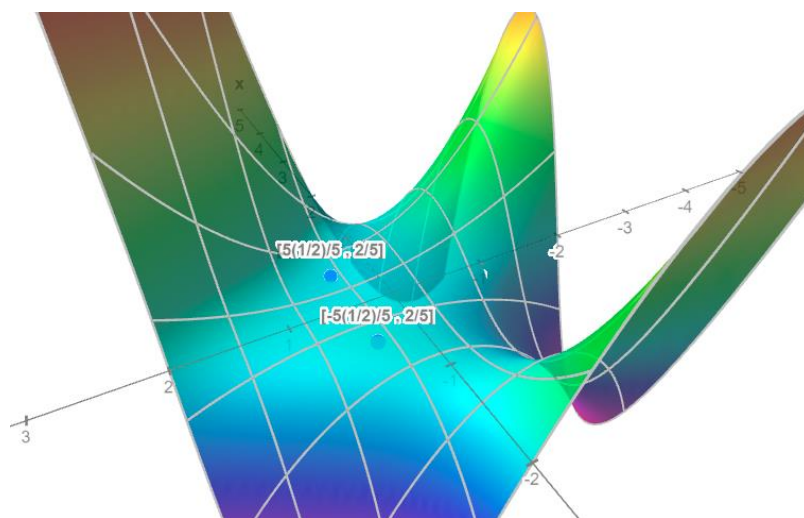
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0]$, $[-1,0]$, $[1,0]$, $[0,1]$, $[-5^{1/2}/5, 2/5]$ και $[5^{1/2}/5, 2/5]$. Τα σημεία $[0,0]$, $[-1,0]$, $[1,0]$ και $[0,1]$ δεν αποτελούν τοπικά ακρότατα ενώ το σημείο $[-5^{1/2}/5, 2/5]$ είναι **τοπικός μεγιστοποιητής** και το σημείο $[5^{1/2}/5, 2/5]$ είναι **τοπικός ελαχιστοποιητής** όπως φαίνεται και στην παρακάτω γραφική παράσταση.



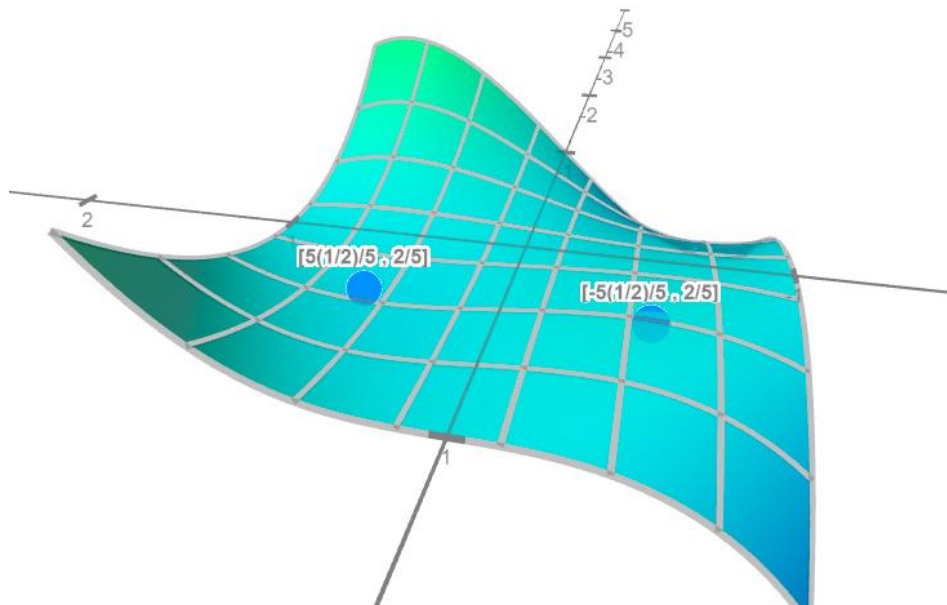
Σημεία $[0,1]$ και $[-1,0]$



Σημεία $[0,0]$ και $[1,0]$



Σημεία $[-5^{1/2}/5, 2/5]$ και $[5^{1/2}/5, 2/5]$ (1)

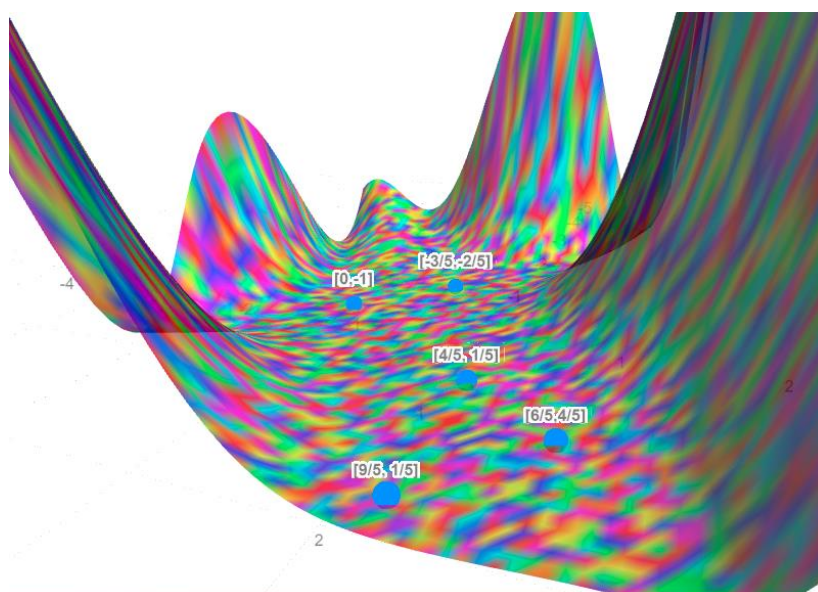


Σημεία $[-5^{1/2}/5, 2/5]$ και $[5^{1/2}/5, 2/5]$ (2)

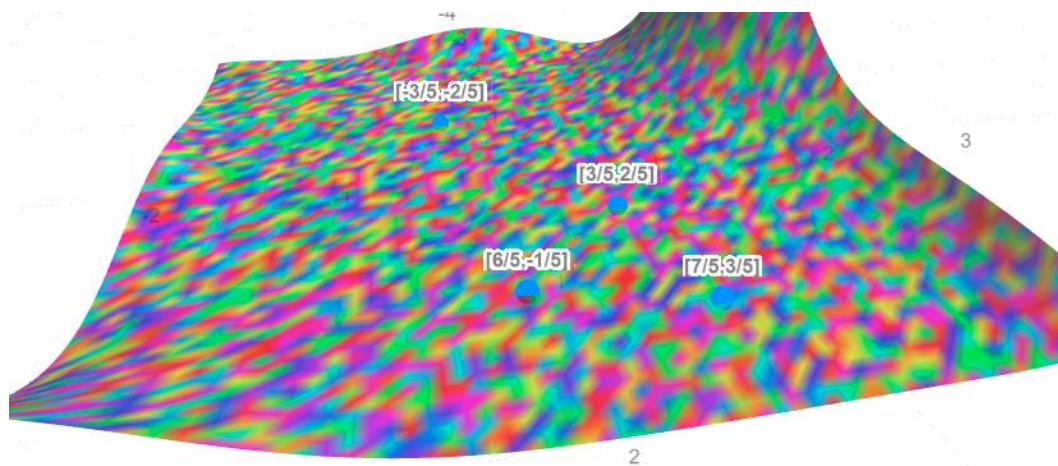
Παράδειγμα 3:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = [1 + (x_1 + x_2 + 1)^2 * (19 - 14*x_1 + 3*x_1^2 - 14*x_2 + 6*x_1*x_2 + 3*x_2^2)] * [30 + (2*x_1 - 3*x_2)^2 * (18 - 32*x_1 + 12*x_1^2 + 48*x_2 - 36*x_1*x_2 + 27*x_2^2)]$

Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0, -1]$, $[-2/5, -3/5]$, $[-3/5, -2/5]$, $[4/5, 1/5]$, $[3/5, 2/5]$, $[6/5, -1/5]$, $[9/5, 1/5]$, $[7/5, 3/5]$ και $[6/5, 4/5]$. Όπου τοπικοί ελαχιστοποιητές αποτελούν τα σημεία $[0, -1]$, $[9/5, 1/5]$, $[-3/5, -2/5]$, $[6/5, 4/5]$, τοπικο μεγιστοποιητή αποτελεί το σημείο $[4/5, 1/5]$ ενώ τα $[-2/5, -3/5]$, $[3/5, 2/5]$, $[6/5, -1/5]$ και $[7/5, 3/5]$ δεν αποτελούν τοπικούς βελτιστοποιητές.



Σημεία τοπικών ελαχιστοποιητών και μεγιστοποιητών.



Σημεία που δεν αποτελούν τοπικούς βελτιστοποιητές.

Ιδιοτιμές:

Στον τρίτο και τελευταίο τρόπο για την εύρεση τοπικών ακροτάτων, για κάθε Εσσιανό πίνακα ενός κρίσιμου σημείου υπολογίζονται οι ιδιοτιμές του με την χρήση της εντολής `eig()`. Έπειτα σύμφωνα με τα κριτήρια για τον χαρακτηρισμό των κρίσιμων σημείων με ιδιοτιμές, εκτυπώνεται αν είναι τοπικός ελαχιστοποιητής/μεγιστοποιητής ή δεν είναι βελτιστοποιητής ή ο αλγόριθμος δεν μπορεί να το προσδιορίσει.

Κριτήριο αξιολόγηση κρίσιμων σημείων:

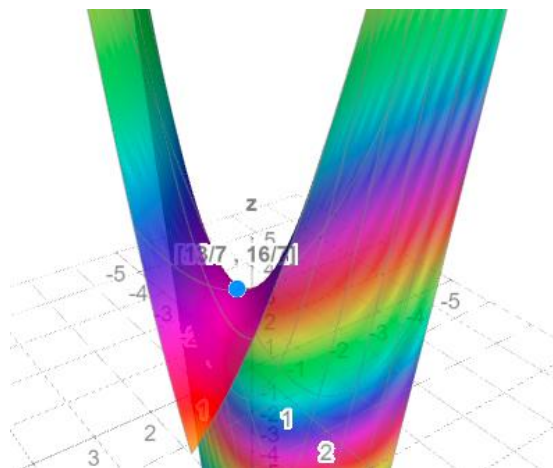
Θεώρημα 2.7 Έστω μία πραγματική συνάρτηση $f : X \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ n μεταβλητών, η οποία είναι C^2 στο ανοικτό υποσύνολο X του \mathbb{R}^n και $\mathbf{x}^* \in X$ με $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ (κρίσιμο σημείο της f) και $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ ο Εσσιανός πίνακας της f στο σημείο \mathbf{x}^* . Τότε, ισχύουν οι ισχυρισμοί:

- (1) Αν οι ιδιοτιμές του $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ είναι **θετικές** τότε το \mathbf{x}^* είναι **τοπικός ελαχιστοποιητής** της f .
- (2) Αν οι ιδιοτιμές του $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ είναι **αρνητικές** τότε το \mathbf{x}^* είναι **τοπικός μεγιστοποιητής** της f .
- (3) Αν ο πίνακας $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ έχει μία (τουλάχιστον) **θετική ιδιοτιμή** και μία (τουλάχιστον) **αρνητική ιδιοτιμή** τότε το \mathbf{x}^* **δεν είναι τοπικός βελτιστοποιητής** της f .

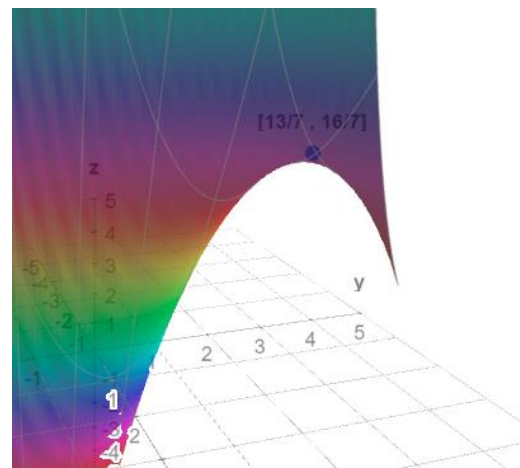
Παράδειγμα 1:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = x_1^2 - 6x_1x_2 + 2x_2^2 + 10x_1 + 2x_2 - 5$

Το κρίσιμο σημείο που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι το $[13/7, 16/7]$ με ιδιοτιμές $\lambda_1 = 3 - 37^{1/2} < 0$ και $\lambda_2 = 37^{1/2} + 3 > 0$. Επομένως το σημείο $[13/7, 16/7]$ δεν αποτελεί **τοπικό βελτιστοποιητή** το οποίο και φαίνεται στην παρακάτω γραφική παράσταση.



Σημείο $[13/7, 16/7]$ (1)



Σημείο $[13/7, 16/7]$ (2)

Παράδειγμα 2:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2, x_3) = (x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2) \cdot \exp^{-(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}$;

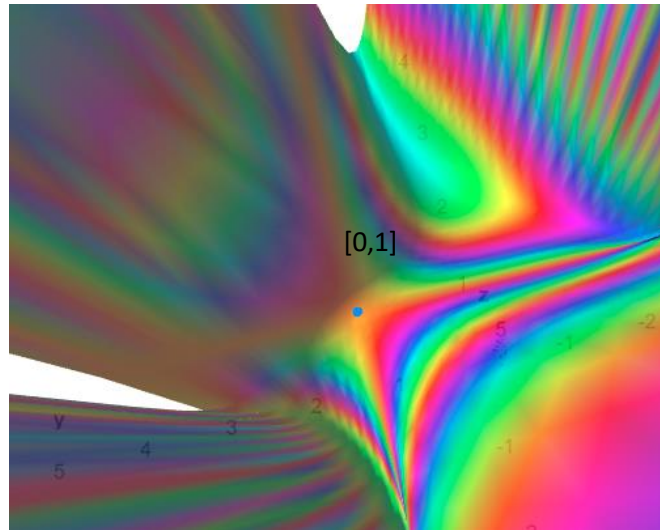
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,0,0]$, $[-1,0,0]$, $[1,0,0]$, $[0,-1,0]$, $[0,1,0]$, $[0,0,-1]$ και $[0,0,1]$. Οι ιδιοτιμές αυτών είναι οι $(2,4,6)$, $(2e^{-1}, -4e^{-1}, 4e^{-1})$, $(2e^{-1}, -4e^{-1}, 4e^{-1})$, $(-2e^{-1}, 2e^{-1}, 8e^{-1})$, $(-2e^{-1}, 2e^{-1}, 8e^{-1})$, $(-2e^{-1}, -4e^{-1}, -12e^{-1})$ και $(-2e^{-1}, -4e^{-1}, -12e^{-1})$ αντίστοιχα.

Επομένως το σημείο $[0,0,0]$ είναι τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1), τα σημεία $[-1,0,0]$, $[1,0,0]$, $[0,-1,0]$, $[0,1,0]$ δεν αποτελούν τοπικούς βελτιστοποιητές (κανόνας 3) και τα σημεία $[0,0,-1]$, $[0,0,1]$ είναι τοπικοί μεγιστοποιητές (κανόνας 2).

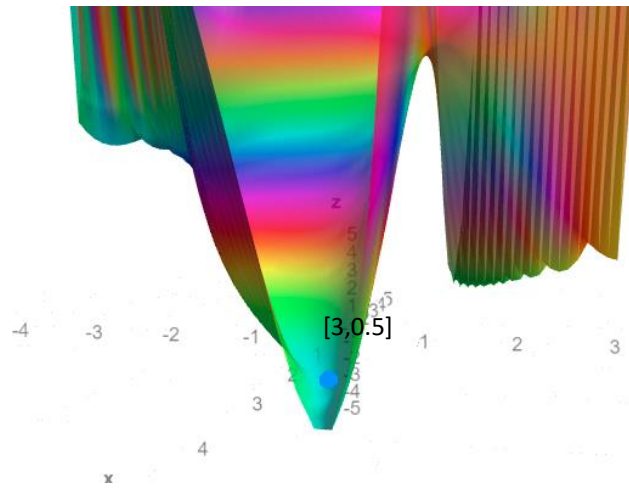
Παράδειγμα 3:

Έστω η συνάρτηση $f(x_1, x_2) = (1.5 - x_1 + x_1 \cdot x_2)^2 + (2.25 - x_1 + x_1 \cdot x_2^2)^2 + (2.625 - x_1 + x_1 \cdot x_2^3)^2$;

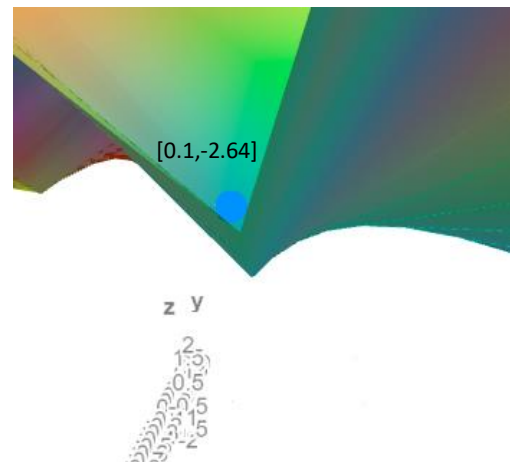
Τα κρίσιμα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος είναι τα $[0,1]$, $[3,0.5]$ και $[0.1, -2.64]$. Οι ιδιοτιμές των κρίσιμων σημείων είναι οι $[27.75, -27.75]$, $[48.97, 0.3]$ και $[867.75, -0.78]$. Επομένως τα σημεία $[0,1]$ και $[0.1, -2.64]$ δεν είναι τοπικοί βελτιστοποιητές (κανόνας 3), ενώ το σημείο $[3,0.5]$ είναι τοπικός ελαχιστοποιητής (κανόνας 1) όπως και φαίνεται από τις γραφικές παραστάσεις παρακάτω.



Σημείο $[0,1]$



Σημείο $[3,0.5]$



Σημείο $[0.1,-2.64]$