Najważniejsze wiadomości dla metod gradientowych

Gradientowe metody kierunków poprawy

Ogólny algorytm:

1. **wyznaczenie kierunku poszukiwań**

2. **określenie minimum w tym kierunku (np. interpolacja kwadratowa lub sześcienna)**

Metoda Newtona Raphsona

W metodzie Newtona do wyznaczenia kierunku poszukiwań wykorzystuje się gradient funkcji oraz Hessian – macierz drugich pochodnych. Metoda ta jest bardzo szybko zbieżna dla funkcji kwadratowych. Jej wadą jest rozbieżności dla niektórych funkcji i punktów początkowych oraz konieczność liczenia i odwracania Hessianu.

Metoda Newtona Raphsona

- **Oznaczenia:**
- x_0 – pierwsze przybliżenie rozwiązania (punkt startowy)
- x_i – i-te przybliżenie rozwiązania
- H – macierz drugich pochodnych (Hessian) –
  $H = \nabla^2 f(x_i)$

ε – wymagana dokładność

Metoda Newtona Raphsona

- **Algorytm:**
  1. Ustal i:=0, x_0, $\varepsilon > 0$
  2. Sprawdź, czy punkt x_i spełnia kryterium stopu – jeśli $|\nabla^2 f(x_i)|^2 \leq \varepsilon$ to x_i jest rozwiązaniem
  3. Wyznacz kolejne przybliżenie rozwiązania $x_{i+1}=x_i+\lambda_i d_i$, gdzie

     - $d_i:=-H^{-1}(x_i)\nabla f(x_i)$ jest kierunkiem poprawy,

     - $H^{-1}(x_i)$ jest macierzą odwrotną do macierzy drugich pochodnych w punkcie x_i, natomiast $\lambda_i>0$ to długość kroku minimalizująca jednowymiarową funkcję

     $f(\lambda_i)=f(x_i + \lambda_i d_i)$

Metoda Newtona Raphsona

4. i:=i+1
5. Idź do punktu 2.

Uzupełnienie do met. Newtona

Wzór:

$A^{-1}=(A^D)^T \cdot 1/\det(A)$

gdzie:

A^{-1} - macierz odwrotna

A^D - macierz dopełnień algebraicznych

$(A^D)^T$ - macierz dołączona - czyli transponowana z macierz dopełnień algebraicznych

det(A) - wyznacznik macierzy

MACIERZ MUSI BYĆ NIEOSOBLIWA CZYLI $\det(A) \neq 0$!!!

Metoda gradientu prostego

W przeciwieństwie do metody bezgradientowej, zamiast szukać minimum wykonywany jest krok o długości **e**

Oznaczenia:

- x_0 - arbitralnie wybrany punkt startowy
- e - początkowa długość skoku
- β - współczynnik zmniejszenia kroku
- ε - wymagana dokładność obliczeń minimum
- n - liczba zmiennych niezależnych

Metoda gradientu prostego

Algorytm obliczeń:

1. oblicz w punkcie startowym $\boldsymbol{x}_0$ wartość funkcji celu $F_0 = f(\boldsymbol{x}_0)$ oraz jej gradient $\nabla_0 = \nabla(\boldsymbol{x}_0)$
2. wyznacz kierunek poszukiwań $\boldsymbol{\xi} = -\ \nabla_0$
3. wzdłuż kierunku ξ wykonaj krok o długości e oraz określ współrzędne nowego punktu:

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + e\ \boldsymbol{\xi},$$

przy czym dla pierwszej iteracji $\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_0$

Metoda gradientu prostego

4. Obliczamy w nowym punkcie wartość funkcji
   $F = f(\boldsymbol{x}_{i+1})$ oraz gradientu $\nabla = \nabla(\boldsymbol{x}_{i+1})$.
   Jeśli krok był pomyślny $F < F_0$, to powtarzamy
   od (2) podstawiając ∇ w miejsce ∇_0

W przeciwnym wypadku:

5. Sprawdzamy, czy osiągnęliśmy minimum. Jeśli nie, wracamy do (4) podstawiając

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_{i+1} - e\xi$$

   oraz zmniejszamy krok o β *i* przechodzimy do (3)

Schemat poszukiwania ekstremum f. 2 zmiennych

1. Liczymy pochodne cząstkowe I-go rzędu
2. Przyrównujemy te pochodne do zera, tworząc układ równań
3. Układ rozwiązujemy, mamy rozwiązania (o ile istnieją)
4. Każde rozwiązanie to tzw. „punkt stacjonarny", czyli taki, w którym może (ale nie musi) być ekstremum. Wypisujemy je (nie należące do dziedziny oczywiście odrzucamy)

Schemat poszukiwania ekstremum f. 2 zmiennych

Badanie istnienia ekstremów w punktach stacjonarnych

1. Liczymy pochodne cząstkowe drugiego rzędu;
   (uwaga: pochodne mieszane powinny wyjść
   takie same)
2. Z pochodnych cząstkowych drugiego rzędu tworzymy wyznacznik
3. Do utworzonego wyznacznika wstawiamy jeden po drugim współrzędne kolejnych punktów stacjonarnych
   - jeśli $W(P_1) > 0$ wtedy w punkcie P_1funkcja osiąga ekstremum
   - jeśli $W(P_1) < 0$ wtedy w punkcie P_1funkcja nie osiąga ekstremum
   - jeśli $W(P_1) = 0$ nie możemy rozstrzygnąć, czy w punkcie P_1
     funkcja osiąga ekstremum
4. Zajmujemy się już tylko punktami, w których funkcja osiągnęła ekstremum; Określamy, czy są to minima, czy maksima lokalne.