ΔΙΑΣΤΗΜΑΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΑΙ ΟΛΙΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ Γ. ΣΩΤΗΡΟΠΟΥΛΟΣ

ΠΑΤΡΑ, ΜΑΪΟΣ 2005

Στους γονείς μου
Γρηγόρη & Αγγελική
με ευγνωμοσύνη και αγάπη

Ευχαριστίες

Έχοντας φτάσει στο τέλος της διδακτορικής μου διατριβής νοιώθω την υποχρέωση να αναφερθώ στους ανθρώπους (συνεργάτες, συναδέλφους και φίλους) που, ο καθένας με το δικό του τρόπο, σημάδεψαν την πορεία μου στα χρόνια των μεταπτυχιακών μου σπουδών και να τους ευχαριστήσω.

Πρώτα από όλους, ευχαριστώ την επιβλέπουσά μου, κα Θεοδούλα Γράψα, Επίκουρη Καθηγήτρια του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Πατρών, γιατί η συνεργασία της μαζί μου υπήρξε καταλυτική στην ολοκλήρωση των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Τα ερευνητικά αποτελέσματα που στηρίζουν την παρούσα διατριβή προέκυψαν από τη συνεργασία μου με την κα Γράψα. Η συνεργασία μας ξεκίνησε από την εποχή που ήμουν δευτεροετής φοιτητής, στα πλαίσια του μαθήματος Αριθμητική Ανάλυση II. Από αυτήν πήρα τις πρώτες βάσεις στην Αριθμητική Ανάλυση και τον προγραμματισμό. Η αμέριστη ηθική συμπαράστασή της, η εμπιστοσύνη της στο άτομό μου, ειδικά τα τελευταία χρόνια, με όπλισε με αυτοπεποίθηση, δύναμη και μου έδωσε το κουράγιο να συνεχίσω την προσπάθειά μου για την επίτευξη της διδακτορικής διατριβής μου. Καθ' όλη τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών ως επιβλέπουσά μου, ήταν πάντα δίπλα μου, ακόμα και σε ώρες πέραν της εργασίας της.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω και τα άλλα δύο μέλη της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής, τους Καθηγητές κ.κ. Κ. Ιορδανίδη και Χ. Μπότσαρη.

Γνώρισα τον κ. Ιορδανίδη, Καθηγητή, στο τρίτο έτος των προπτυχιακών μου σπουδών στα πλαίσια του μαθήματος «Αριθμητική Επίλυση Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων», ο οποίος με βοήθησε τόσο στην εμπέδωση από μέρους μου πολλών βασικών εννοιών των Υπολογιστικών Μαθηματικών, όσο και στην περαιτέρω ενασχόλησή μου με τον προγραμματισμό. Επίσης, είχα την τιμή ως μεταπτυχιακός, να συνεργαστώ μαζί του στα πλαίσια του επικουρικού έργου των μαθημάτων του. Τον ευχαριστώ θερμά για την συστηματική παρακολούθηση της εργασίας μου και το αμέριστο ενδιαφέρον του στα ποικίλα προβλήματα που αντιμετώπισα στη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών.

Θέλω επίσης να ευχαριστήσω τον κ. Χ. Μπότσαρη, Καθηγητή, για την άμεση ανταπόκριση του στις ερευνητικές μου αναζητήσεις και τις πολύτιμες συζητήσεις που είχα μαζί του καθόλη τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Οι συζητήσεις αυτές αποτέλεσαν την αφετηρία για τη μελλοντική επιτυχή συνεργασία που είχαμε σε ερευνητικό επίπεδο. Η ενασχόλησή μου με τα κωνικά μοντέλα και τις μεθόδους βελτιστοποίησης για προβλήματα μεγάλης κλίμακας, οφείλεται στον κ. Μπότσαρη.

Θα ήταν παράληψή μου να μην ευχαριστήσω τον πρώην επιβλέποντά μου κ. Μι-

χάλη Βραχάτη, Καθηγητή του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Πατρών. Ο κ. Βραχάτης μου υπέδειξε να ασχοληθώ με την Διαστηματική Ανάλυση όταν ήμουν τεταρτοετής φοιτητής. Επίσης, είχα την τύχη να συμμετέχω μαζί του, ως πρωτοετής μεταπτυχιακός, στο πρώτο μου συνέδριο. Παρακολουθώντας τον τόσο στην όλη προετοιμασία του όσο και κατά τη διάρκεια της διάλεξής του, αποκόμισα εμπειρίες, οι οποίες με βοήθησαν στην μετέπειτα πορεία μου.

Θέλω επίσης να ευχαριστήσω τον κ. Λευτέρη Κυρούση, Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής, καθώς και όλα τα μέλη της ερευνητικής του ομάδας και ιδιαίτερος τον Δρ. Α. Καπόρη, για την πραγματικά ευχάριστη και επιτυχή συνεργασία που είχαμε. Η συνεργασία με τον κ. Κυρούση αποτέλεσε το έναυσμα για την ανάπτυξη αποδοτικών μεθόδων για δύσκολα υπολογιστικά προβλήματα βελτιστοποίησης και επίλυσης μη γραμμικών συστημάτων εξισώσεων.

Αισθάνομαι την ανάγκη να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου και τις θερμές ευχαριστίες μου στην κα Βεννέτα Λαμπροπούλου, Καθηγήτρια του Παιδαγωγικού Τμήματος Δημοτικής Εκπαίδευσης του Πανεπιστημίου Πατρών, για τις πολύτιμες συμβουλές της καθώς και την οικονομική υποστήριξη που μου παρείχε για μεγάλο χρονικό διάστημα, ως επιστημονική υπεύθυνη, στα πλαίσια ερευνητικού προγράμματος.

Θερμές ευχαριστίες θέλω να απευθύνω και στον αδελφικό μου φίλο και συνεργάτη Δρ. Ηλία Σταυρόπουλο. Με τον Ηλία συνεργαστήκαμε ερευνητικά από τις αρχές ακόμα της ερευνητικής μας πορείας, με θετικά αποτελέσματα. Θα ήθελα να τον ευχαριστήσω ολόθερμα γιατί στάθηκε πάντα δίπλα μου στις δύσκολες στιγμές και μου έδινε κουράγιο να συνεχίσω.

Θέλω επίσης να ευχαριστήσω τους υποψήφιους διδάκτορες και στενούς συνεργάτες μου κ.κ. Α. Κωστόπουλο και Ι. Νίκα. Η βοήθεια τους στο στάδιο της συγγραφής της παρούσας διατριβής ήταν πολύτιμη.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου Γρηγόρη και Αγγελική καθώς και την αδελφή μου Δήμητρα για την αμέριστη συμπαράστασή τους όλα αυτά τα δύσκολα χρόνια των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Στους γονείς μου αφιερώνω το παρόν πόνημα, ως ελάχιστο δείγμα ευγνωμοσύνης για την κατανόηση και την υπομονή τους όλα αυτά τα χρόνια.

Δημήτρης Σωτηρόπουλος

Πάτρα, Μαΐος 2005

Περίληψη

Στην παρούσα διατριβή μελετάμε το πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης

$$f^* = \min_{x \in [x]} f(x)$$

όπου $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $\mathcal{D}$ είναι η κλειστή θήκη ενός μη κενού φραγμένου ανοιχτού υποσυνόλου του $\mathbb{R}$ και το $[x] \subseteq \mathcal{D}$ είναι το διάστημα αναζήτησης όπου είναι περιορισμένη η μεταβλητή x . Στόχος μας είναι να βρούμε το ολικό ελάχιστο f^* καθώς και το σύνολο των σημείων ολικού ελαχίστου (ή ολικών ελαχιστοποιητών)

$$\mathcal{X}^* = \{x^* \in [x] : f(x^*) = f^*\}$$

της f .

Η προσέγγιση μας για το παραπάνω πρόβλημα έγκειται σε αιτιοκρατικές μεθόδους και συγκεκριμένα σε μεθόδους της Διαστηματικής Ανάλυσης.

Το Κεφάλαιο 1 είναι εισαγωγικό. Σε αυτό παραθέτουμε βασικές έννοιες της Διαστηματικής Ανάλυσης, όπως είναι ο ορισμός των πράξεων της διαστηματικής αριθμητικής καθώς και της επεκταμένης διαστηματικής αριθμητικής, η επέκταση των πραγματικών συναρτήσεων στον πραγματικό διαστηματικό χώρο $\mathbb{IR}$ και η θεμελιώδης έννοια της συνάρτησης εγκλεισμού η οποία μας παρέχει ασφαλή φράγματα για το πεδίο τιμών μιας συνάρτησης. Περιγράφουμε επίσης τις τρεις βασικότερες συναρτήσεις εγκλεισμού που χρησιμοποιούν μηδενικής, πρώτης ή δεύτερης τάξης πληροφορία παραγώγου, αντίστοιχα.

Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται αναφορά στο πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης μέσω διαστηματικών μεθόδων. Αναλυτικότερα δίνουμε το βασικό διαστηματικό αλγόριθμο διακλάδωσης και φραξίματος (branch and bound algorithm), όπου βασίζονται όλες οι διαστηματικές μέθοδοι που είναι ικανές να παρέχουν αξιόπιστα φράγματα για τις λύσεις. Στη συνέχεια αναφέρουμε τις σημαντικότερες στρατηγικές όσον αφορά την επιλογή ενός διαστήματος από το δέντρο αναζήτησης καθώς και την υποδιαίρεση του. Τέλος, παραθέτουμε τις διαδικασίες επιτάχυνσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε κάθε περίπτωση ανάλογα με τη διαθέσιμη πληροφορία που έχουμε για την αντικειμενική συνάρτηση.

Τα Κεφάλαια 3, 4 και 5 περιλαμβάνουν τα καινούργια αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία συνοψίζονται στα συμπεράσματα κάθε κεφαλαίου.

Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 3 προσδιορίζουμε τα βέλτιστα κέντρα (optimal centers) για την μορφή μέσης τιμής (mean value form) η οποία μας παρέχει διαστήματα εγκλεισμού για το πεδίο τιμών. Διατυπώνουμε ένα θεώρημα, το οποίο μας παρέχει τα βέλτιστα κέντρα

c^- και c^+ σε συμμετρικές κλειστές μορφές και αποδεικνύουμε ότι, όταν η μορφή της μέσης τιμής εφοδιαστεί με τα βέλτιστα κέντρα, παράγονται βέλτιστες μορφές αναφορικά με το κάτω ή το άνω φράγμα, αντίστοιχα. Επιπλέον, αποδεικνύουμε αυστηρά την εικασία του Baumann, η οποία αφορά το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού που παράγεται από τη μορφή μέσης τιμής. Προσδιορίζουμε τα άνω και κάτω φράγματα των βέλτιστων μορφών, με κλειστές αναλυτικές μορφές και μέσω μιας Πρότασης αποδεικνύουμε ότι δεν είναι απαραίτητο το πλάτος του διαστήματος $[x]$ να τείνει στο μηδέν, προκειμένου να έχουμε ένα ακριβές κάτω φράγμα για το πεδίο τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης f εντός του $[x]$. Τα θεωρητικά αποτελέσματα υποδεικνύουν μία νέα στρατηγική υποδιαίρεσης για διαστηματικές μεθόδους ολικής ελαχιστοποίησης. Τέλος, προτείνουμε ένα υπολογιστικό κριτήριο για την επιλογή της κατάλληλης συνάρτησης εγκλεισμού, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ένα συγκεκριμένο βήμα ενός διαστηματικού αλγορίθμου που χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία.

Στο Κεφάλαιο 4, παρουσιάζουμε μια νέα μέθοδο διακλάδωσης και φραξίματος για τον υπολογισμό εγγυημένων φραγμάτων τόσο για το ολικό ελάχιστο όσο και για τους ολικούς ελαχιστοποιητές μονοδιάστατων αντικειμενικών συναρτήσεων, όταν η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι περιορισμένη σε ένα κλειστό και φραγμένο διάστημα. Αναπτύσσουμε μια νέα διαδικασία επιάχυνσης η οποία αποτελείται από γραμμικά βήματα αποκοπής. Τα γραμμικά βήματα αποκοπής (εσωτερικά και εξωτερικά) αποκλείουν μεγάλα τμήματα του χώρου αναζήτησης όταν δεν υπάρχει ολικός ελαχιστοποιητής. Ο αλγόριθμος που παρατίθεται εκμεταλλεύεται τις ιδιότητες του βέλτιστου κέντρου c^- όχι μόνο για τη διαδικασία παραγωγής αξιόπιστων κάτω φραγμάτων για την αντικειμενική συνάρτηση, αλλά και στη διαδικασία αποκοπής περιοχών όπου με εγγύηση δεν υφίσταται ολικός ελαχιστοποιητής. Επιπλέον, το εσωτερικό βήμα αποκοπής που προτείνεται συνιστά μία νέα στρατηγική διακλάδωσης για διαστηματικούς αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος. Η στρατηγική αυτή μπορεί να θεωρηθεί βέλτιστη διότι όχι μόνο επιτυγχάνουμε την διακλάδωση, αλλά ταυτοχρόνως απορρίπτουμε τμήματα όπου δεν υπάρχει βέλτιστη λύση. Ο αλγόριθμός μας έχει υλοποιηθεί και δοκιμαστεί σε ένα καθιερωμένο σύνολο από 40 ελεγκτικές συναρτήσεις¹ και τα αριθμητικά αποτελέσματα δείχνουν ότι η προτεινόμενη μέθοδος πάντα υπερισχύει των πιο πρόσφατων μεθόδων.

Η διατριβή ολοκληρώνεται με το Κεφάλαιο 5, το οποίο περιλαμβάνει μια μέθοδο ομαλοποίησης για $\min\max$ προβλήματα. Σε αυτό το κεφάλαιο εφαρμόζουμε την προτεινόμενη μέθοδο διακλάδωσης και αποκοπής προκειμένου να υπολογίσουμε εγγυημένα φραγμάτα για τις λύσεις μονοδιάστατων προβλημάτων $\min\max$. Ο αλγόριθμος που προτείνουμε, χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία που συνάγεται από τη συνάρτηση ομαλοποίησης της μη διαφορίσιμης αντικειμενικής συνάρτησης. Οι συναρτήσεις εγκλεισμού που προκύπτουν από τη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας μπορούν να διασφαλίσουν εγγυημένα φράγματα που είναι ανεξάρτητα της εντροπικής παραμέτρου p , $p \rightarrow \infty$. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του αλγορίθμου στη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας, δείχνουν ότι το συναρτησιακό της μέγιστης εντροπίας σε συνδυασμό με εργαλεία της διαστηματικής ανάλυσης μπορούν να αποτελέσουν το θεωρητικό υπόβαθρο για την αντιμετώπιση μη

¹Για τα γραφήματα των συναρτήσεων και τα αριθμητικά αποτελέσματα, βλέπε Παράρτημα, σελ.105.

διαφορίσιμων προβλημάτων ολικής βελτιστοποίησης από διαστηματικές μεθόδους.

Τέλος, παραθέτουμε ένα παράρτημα με 40 ελεγκτικές συναρτήσεις οι οποίες έχουν χρησιμοποιηθεί για να αποτιμηθεί η προτεινόμενη μέθοδος.

Περιεχόμενα

Περίληψη	vii
Περιεχόμενα	xi
1 Μαθηματικό Υπόβαθρο Διαστηματικής Ανάλυσης	1
1.1 Πραγματικά διαστήματα – διαστηματικοί αριθμοί	1
1.2 Διαστηματικά διανύσματα και πίνακες	4
1.3 Πραγματική διαστηματική αριθμητική	5
1.3.1 Βασικές αλγεβρικές ιδιότητες	7
1.3.2 Το πρόβλημα της εξάρτησης	9
1.3.3 Ο κανόνας της διαγραφής	9
1.4 Επεκταμένη διαστηματική αριθμητική	10
1.4.1 Επεκταμένη διαστηματική διαίρεση	10
1.4.2 Επεκταμένη διαστηματική αφαίρεση	12
1.5 Τοπολογία επί του συνόλου των διαστημάτων	12
1.6 Διαστηματικές συναρτήσεις	14
1.7 Συναρτήσεις εγκλεισμού	15
1.7.1 Διαστηματική φυσική επέκταση	16
1.7.2 Κεντροθετημένες μορφές	19
1.7.3 Μορφές μέσης τιμής & Taylor	21
2 Ολική βελτιστοποίηση με διαστηματικές μεθόδους	23
2.1 Εισαγωγή	23
2.2 Το πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης	25
2.3 Διαστηματικοί αλγόριθμοι διακλάδωσης και φραξίματος	26
2.4 Στρατηγικές επιλογής διαστήματος	27
2.4.1 Oldest-first στρατηγική	28
2.4.2 Best-first στρατηγική	29
2.4.3 Depth-first στρατηγική	30
2.5 Στρατηγικές υποδιαίρεσης διαστήματος	30
2.6 Διαδικασίες επιτάχυνσης	32
2.6.1 Το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών	32
2.6.2 Το τεστ του ενδιάμεσου σημείου	33
2.6.3 Κριτήριο μονοτονίας	33

2.6.4	Το κριτήριο της κοιλότητας	36
2.6.5	Η διαστηματική μέθοδος του Νεύτωνα	37
2.6.6	Τοπικές μέθοδοι αναζήτησης	40
3	Βέλτιστα κέντρα & Βέλτιστες μορφές μέσης τιμής	43
3.1	Βασικό κίνητρο μελέτης των μορφών μέσης τιμής	43
3.2	Η μορφή της μέσης τιμής	44
3.3	Βέλτιστες μορφές μέσης τιμής	45
3.3.1	Προσδιορισμός των βέλτιστων κέντρων	46
3.3.2	Βελτιστότητα αναφορικά με το πλάτος	50
3.3.3	Προσδιορισμός άνω και κάτω φραγμάτων βέλτιστων μορφών	54
3.4	Σύγκριση βέλτιστης μορφής μέσης τιμής με τη φυσική επέκταση	58
3.5	Συμπεράσματα	60
3.6	Θέματα υπό μελέτη	60
4	Νέα μέθοδος διακλάδωσης & αποκοπής	63
4.1	Εισαγωγή	63
4.2	Γραμμικά βήματα αποκοπής	65
4.2.1	Εσωτερικό βήμα αποκοπής	66
4.2.2	Εξωτερικό βήμα αποκοπής	68
4.2.3	Ο αλγόριθμος βημάτων αποκοπής	71
4.3	Ο κύριος αλγόριθμος διακλάδωσης και αποκοπής	73
4.3.1	Φράσσοντας την αντικειμενική συνάρτηση	73
4.3.2	Διαδικασίες επιτάχυνσης και αποκοπής	74
4.3.3	Κριτήριο τερματισμού	76
4.3.4	Οργάνωση λίστας	76
4.3.5	Περιγραφή του αλγορίθμου	76
4.4	Αριθμητικά αποτελέσματα	79
4.5	Συμπεράσματα	81
5	Εντροπική μέθοδος ομαλοποίησης για προβλήματα minimax	85
5.1	Εισαγωγή	85
5.2	Γενικές μέθοδοι ομαλοποίησης για προβλήματα minimax	86
5.3	Η εντροπική μέθοδος ομαλοποίησης	87
5.4	Συναρτήσεις εγκλεισμού της μέγιστης εντροπίας	91
5.4.1	Προσδιορισμός συνάρτησης εγκλεισμού της f_p	91
5.4.2	Προσδιορισμός συνάρτησης εγκλεισμού της f'_p	93
5.5	Αλγόριθμος διακλάδωσης & αποκοπής για προβλήματα minimax	95
5.6	Αριθμητικά αποτελέσματα	96
5.6.1	Έξοδος προγράμματος για $\epsilon = 10^{-12}$ και $p = 10^{+308}$	98
5.7	Συμπεράσματα	103
	Παράρτημα	105
	Βιβλιογραφία	147

Κεφάλαιο 1

Μαθηματικό Υπόβαθρο Διαστηματικής Ανάλυσης

Το παρόν κεφάλαιο αποτελεί μια σύντομη εισαγωγή στη Διαστηματική Ανάλυση (Interval Analysis). Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι να παρουσιάσουμε τις βασικές έννοιες που αφορούν τη διαστηματική αριθμητική, μερικές βασικές αλγεβρικές ιδιότητες και τη θεμελιώδη έννοια της συνάρτησης εγκλεισμού, η οποία αποτελεί το βασικό εργαλείο στις διαστηματικές μεθόδους ολικής βελτιστοποίησης. Επιπλέον, εισάγουμε τους απαραίτητους συμβολισμούς οι οποίοι θα χρησιμοποιηθούν στα επόμενα κεφάλαια. Για περισσότερη θεωρητική μελέτη ο αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει στα συγγράμματα [Μοο79, ΑΗ83, Νευ90].

1.1 Πραγματικά διαστήματα — διαστηματικοί αριθμοί

Στην ενότητα αυτή δίνουμε τους βασικούς ορισμούς και κάποιες απαραίτητες ιδιότητες από την Ανάλυση Διαστημάτων.

Ορισμός 1.1.1 (διαστηματικός αριθμός) Ορίζουμε ως διαστηματικό αριθμό (interval number) το σύνολο των πραγματικών αριθμών που περιέχονται στο κλειστό και φραγμένο διάστημα $[x] = [\underline{x}, \overline{x}]$. Δηλαδή,

$$[x] = [\underline{x}, \overline{x}] = \{x \in \mathbb{R} : \underline{x} \leq x \leq \overline{x}, \underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}\}.$$

Στην συνέχεια, θα χρησιμοποιούνται οι όροι *διαστηματικός αριθμός* και *διάστημα* εναλλακτικά. Θα συμβολίζουμε το σύνολο των πραγματικών διαστηματικών αριθμών με $\mathbb{IR}$, δηλαδή $\mathbb{IR} = \{[\underline{x}, \overline{x}] : \underline{x} \leq \overline{x}; \underline{x}, \overline{x} \in \mathbb{R}\}$, ενώ τα στοιχεία του με μικρά γράμματα εντός αγκυλών. Δοθέντος ενός διαστηματικού αριθμού $[x]$, θα αναφερόμαστε στο κάτω άκρο του διαστήματος με $\underline{x}$ ή $\inf[x]$ ενώ στο άνω άκρο με $\overline{x}$ ή $\sup[x]$. Ένας πραγματικός αριθμός x είναι ισοδύναμος με τον διαστηματικό αριθμό $[x]$ με $\underline{x} = \overline{x}$. Ένα τέτοιο διάστημα καλείται εκφυλισμένο.

Το $\mathbb{IR}$ μπορεί να εμφυτευτεί στο $\mathbb{R}^2$ θεωρώντας την απεικόνιση $\pi : \mathbb{IR} \rightarrow \mathbb{R}^2$, η οποία ορίζεται ως $[\underline{a}, \overline{a}] \mapsto (\underline{a}, \overline{a})$ και απεικονίζει έναν διαστηματικό αριθμό σε ένα σημείο του $\mathbb{R}^2$. Επομένως, μπορούμε να παραστήσουμε γεωμετρικά το χώρο $\mathbb{IR}$ ως το άνω

ημιεπίπεδο του Ευκλείδειου χώρου $\mathbb{R}^2$, το οποίο παράγεται από την πρώτη διαγώνιο $y = x$ συμπεριλαμβανομένης και αυτής (βλέπε Σχήμα 1.1). Τα σημεία του $\mathbb{R}^2$ που βρίσκονται επί της διαγωνίου $y = x$ αντιστοιχούν στα εκφυλισμένα διαστήματα.

Σχήμα 1.1. Το σύνολο $\mathbb{I}\mathbb{I}\mathbb{I}$ με $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y \geq x\}$.

Παράδειγμα 1.1.1 Τα στοιχεία $[-3, 4]$, $[1, 1]$, και $[\pi, 7]$ ανήκουν στο $\mathbb{I}\mathbb{I}\mathbb{I}$, ενώ τα $[2, -1]$ και $[0, -\infty]$ δεν ανήκουν.

Σύμφωνα με τον Ορισμό 1.1.1, οι διαστηματικοί αριθμοί είναι σύνολα, οπότε τα στοιχεία του $\mathbb{I}\mathbb{I}\mathbb{I}$ κληρονομούν όλες τις σχέσεις συνόλων, όπως π.χ. $=$, $\subseteq$, $\subset$, και $\overset{\circ}{\subset}$ οι οποίες και ορίζονται ως εξής

$$\begin{aligned} [a] &= [b] && \Leftrightarrow \underline{a} = \underline{b} \text{ και } \overline{a} = \overline{b} \\ [a] &\subseteq [b] && \Leftrightarrow \underline{b} \leq \underline{a} \text{ και } \overline{a} \leq \overline{b} \\ [a] &\subset [b] && \Leftrightarrow [a] \subseteq [b] \text{ και } [a] \neq [b] \\ [a] &\overset{\circ}{\subset} [b] && \Leftrightarrow \underline{b} < \underline{a} \text{ και } \overline{a} < \overline{b} \end{aligned}$$

Η τομή δύο διαστημάτων $[a]$ και $[b]$ είναι το κενό σύνολο, $[a] \cap [b] = \emptyset$, αν $\sup a < \inf b$ ή $\sup b < \inf a$. Διαφορετικά, η τομή των $[a]$ και $[b]$ είναι ένα διάστημα το οποίο ορίζεται ως:

$$[a] \cap [b] = [\max\{\underline{a}, \underline{b}\}, \min\{\overline{a}, \overline{b}\}].$$

Η ένωση δύο διαστημάτων $[a]$ και $[b]$ μπορεί να οριστεί όταν $[a] \cap [b] \neq \emptyset$ και είναι ομοίως ένα διάστημα

$$[a] \cup [b] = [\min\{\underline{a}, \underline{b}\}, \max\{\overline{a}, \overline{b}\}].$$

Ωστόσο, πολλές φορές χρειαζόμαστε το *διαστηματικό κάλυμμα* δύο διαστημάτων, π.χ. κατά τον υπολογισμό ενός διαστήματος εγκλεισμού του πεδίου τιμών μιας συνάρτησης. Το διαστηματικό κάλυμμα δύο διαστημάτων μπορεί να οριστεί, ακόμα και όταν τα διαστήματα $[a]$

και $[b]$ είναι ξένα μεταξύ τους και ορίζεται ως

$$[a] \sqcup [b] = [\min\{\underline{a}, \underline{b}\}, \max\{\bar{a}, \bar{b}\}].$$

Παράδειγμα 1.1.2 Έστω $[a] = [1, 3]$, και $[b] = [1, \pi]$. Τότε ισχύουν οι ακόλουθες σχέσεις: $\frac{4}{3} \in [a]$, $[a] \subseteq [b]$, $[a] \not\subseteq [b]$ εφόσον $\underline{a} = \underline{b}$. Επιπλέον, έχουμε ότι $[a] \cap [b] = [a]$ και $[a] \cup [b] = [b] = [a] \sqcup [b]$. Αλλά, $[a] \sqcup [4, 5] = [1, 5]$ ενώ η ένωση $[a] \cup [4, 5]$ δεν ορίζεται.

Δοθέντος ενός διαστηματικού αριθμού $[a] \in \mathbb{IR}$, ορίζουμε τις ακόλουθες χαρακτηριστικές ποσότητες, οι οποίες μπορούν να θεωρηθούν και ως διαστηματικές συναρτήσεις πραγματικής τιμής¹

$$w([a]) = \text{wid}([a]) = \bar{a} - \underline{a} \quad (\text{πλάτος διαστήματος})$$

$$r([a]) = \text{rad}([a]) = (\bar{a} - \underline{a})/2, \quad (\text{ακτίνα διαστήματος})$$

$$m([a]) = \text{mid}([a]) = (\underline{a} + \bar{a})/2 \quad (\text{κέντρο διαστήματος})$$

Προφανώς, μπορούμε να γράψουμε $[a] = [m([a]) - r([a]), m([a]) + r([a])]$ απ' όπου προκύπτει ότι: $x \in [a] \Leftrightarrow |x - m([a])| \leq r([a])$. Άρα, η ακτίνα του διαστήματος $[a]$ αποτελεί ένα άνω φράγμα για το απόλυτο σφάλμα του μέσου σημείου $m([a])$ όταν το θεωρήσουμε ως προσέγγιση του αριθμού $x \in [a]$. Επιπροσθέτως, οι ακόλουθες δύο συναρτήσεις πραγ-

Σχήμα 1.2. Χαρακτηριστικά ενός διαστήματος $[a]$

ματικής τιμής

$$\langle [a] \rangle = \text{mig}([a]) = \min\{|a| : a \in [a]\}$$

$$|[a]| = \text{mag}([a]) = \max\{|a| : a \in [a]\}$$

μας παρέχουν την μικρότερη και την μεγαλύτερη απόσταση, αντίστοιχα, των στοιχείων του διαστήματος $[a]$ από το μηδέν (βλέπε Σχήμα 1.2). Η *μικρότερη* (mignitude) και η *μεγαλύτερη απόλυτη τιμή* (magnitude) ενός διαστήματος $[a]$ μπορούν να υπολογιστούν από τις κάτωθι αναλυτικές εκφράσεις

$$\langle [a] \rangle = \begin{cases} 0, & \text{εάν } 0 \in [a], \\ \min\{|\underline{a}|, |\bar{a}|\}, & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad |[a]| = \max\{|\underline{a}|, |\bar{a}|\}.$$

¹βλέπε ενότητα 1.6 περί διαστηματικών συναρτήσεων

Συνδυάζοντας τις παραπάνω δύο συναρτήσεις, μπορούμε να ορίσουμε την *απόλυτη τιμή ενός διαστήματος* ως:

$$\text{abs}([a]) = \{|a| : a \in [a]\} = [\text{mig}([a]), \text{mag}([a])].$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι η απόλυτη τιμή ενός διαστήματος είναι διάστημα σε αντίθεση με την μικρότερη και μεγαλύτερη απόλυτη τιμή που είναι πραγματικοί αριθμοί.

Παράδειγμα 1.1.3 Έστω $[a] = [-2, 3]$ και $[b] = [1, \pi]$. Τότε $|[a]| = 3$, $\langle [a] \rangle = 0$, $|[b]| = \pi$, $\langle [b] \rangle = 1$, $\text{abs}([a]) = [0, 3]$, και $\text{abs}([b]) = [1, \pi]$.

Ας υποθέσουμε ότι, ο πραγματικός αριθμός x , του οποίου η ακριβής τιμή είναι άγνωστη, είναι φραγμένος εντός του διαστήματος $[a]$, δηλ. $\underline{a} \leq x \leq \bar{a}$. Το *σχετικό πλάτος* του διαστήματος $[a]$ αποτελεί ένα μέτρο της ποιότητας των φραγμάτων του x που παρέχονται μέσω του διαστήματος $[a]$ και ορίζεται ως

$$w_{\text{rel}}([a]) = \begin{cases} \frac{w([a])}{\langle [a] \rangle} & \text{εάν } 0 \notin [a] \\ w([a]) & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Το σχετικό πλάτος $w_{\text{rel}}([a])$ αποτελεί ένα άνω φράγμα για το σχετικό σφάλμα του x αναφορικά με ένα αυθαίρετο στοιχείο του διαστήματος $[a]$.

1.2 Διαστηματικά διανύσματα και πίνακες

Καλούμε *διαστηματικό διάνυσμα* (interval vector) το διάνυσμα του οποίου τα στοιχεία του είναι διαστηματικοί αριθμοί. Ομοίως, ένας *διαστηματικός πίνακας* (interval matrix) είναι ένας πίνακας του οποίου τα στοιχεία του είναι διαστήματα. Το σύνολο όλων των n -διάστατων διαστηματικών διανυσμάτων θα συμβολίζεται με $\mathbb{IR}^n$, ενώ το σύνολο όλων των $n \times m$ διαστηματικών πινάκων θα συμβολίζεται με $\mathbb{IR}^{n \times m}$. Έτσι, θα συμβολίζουμε με

$$[x] := ([x]_i)_{i=1, \dots, n} := ([x]_1, \dots, [x]_n)^T \quad \text{για } [x] \in \mathbb{IR}^n$$

και

$$[A] := ([a]_{ij})_{\substack{i=1, \dots, n \\ j=1, \dots, m}} := \begin{pmatrix} [a]_{11} & \cdots & [a]_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ [a]_{n1} & \cdots & [a]_{nm} \end{pmatrix} \quad \text{για } [A] \in \mathbb{IR}^{n \times m}.$$

Γεωμετρικά, ένα πραγματικό διαστηματικό διάνυσμα μπορεί να ερμηνευθεί ως το σύνολο των σημείων στο n -διάστατο χώρο το οποίο είναι φραγμένο από ένα n -διάστατο ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο (βλέπε Σχήμα 1.3). Γι' αυτό και συχνά χρησιμοποιούμε τον όρο *κουτί* ως ένα συνώνυμο του διαστηματικού διαστήματος.

Οι σχέσεις $=$, $\overset{\circ}{\subset}$, και $\subseteq$ ορίζονται ανά συνιστώσα. Για παράδειγμα, η σχέση εσωτερικού εγκλεισμού για $[x], [y] \in \mathbb{IR}^n$ ορίζεται ως: $[x] \overset{\circ}{\subset} [y] \Leftrightarrow [x]_i \overset{\circ}{\subset} [y]_i, i = 1, \dots, n$. Η μέγιστη στάθμη επεκτείνεται στα διαστηματικά διανύσματα και στους διαστηματικούς πίνακες και ορίζεται ως εξής:

$$\|[x]\|_{\infty} := \max_{1 \leq i \leq n} |[x]_i| \quad \text{για } [x] \in \mathbb{IR}^n, \quad (1.2.1)$$

Σχήμα 1.3. Ένα 3-διάστατο διαστηματικό διάνυσμα.

και

$$\|[A]\|_{\infty} := \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^m |[a]_{ij}| \quad \text{για } [A] \in \mathbb{IR}^{n \times m}. \quad (1.2.2)$$

Έτσι, αν B είναι ένας πραγματικός πίνακας που περιέχεται στον διαστηματικό πίνακα $[A]$, τότε ισχύει ότι $\|B\| \leq \|[A]\|$.

Το μέσο ενός διαστηματικού διαστήματος ορίζεται ανά συνιστώσα, δηλ. αν $[x] \in \mathbb{IR}^n$ τότε $m([x]) := (m([x]_1), \dots, m([x]_n))^T$. Όμοια ορίζεται και το μέσο ενός διαστηματικού πίνακα $[A] \in \mathbb{IR}^{n \times m}$. Ο πίνακας των μέσων $m([A])$ είναι ένας πραγματικός πίνακας τα στοιχεία του οποίου ορίζονται ως τα μέσα των αντίστοιχων στοιχείων του διαστηματικού πίνακα, δηλαδή, $m([A])_{ij} = m([a]_{ij})$ και προφανώς ισχύει $m([A]) \in [A]$.

Το μέγιστο πλάτος ενός διαστηματικού διαστήματος $[x] \in \mathbb{IR}^n$ ορίζεται ως

$$w_{\infty}([x]) := \max_{1 \leq i \leq n} w([x]_i), \quad (1.2.3)$$

ενώ το μέγιστο σχετικό πλάτος

$$w_{\text{rel}, \infty}([x]) := \max_{1 \leq i \leq n} w_{\text{rel}}([x]_i). \quad (1.2.4)$$

Παράδειγμα 1.2.1 Έστω $[x] = ([-3, 1], [3, 5])^T \in \mathbb{IR}^2$. Τότε, $m([x]) = (1, 4)^T$, $r([x]) = (2, 1)^T$, $w_{\infty}([x]) = 4$, $w_{\text{rel}, \infty}([x]) = 4$, $\|[x]\| = (3, 5)^T$, $\|[x]\|_{\infty} = 5$.

Παράδειγμα 1.2.2 Έστω $[A] = \begin{pmatrix} [4, 6] & [0, 2] \\ [-2, 0] & [2, 4] \end{pmatrix}$. Τότε $m([A]) = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$, $r([A]) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, $\|[A]\| = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$, $\|[A]\|_{\infty} = 8$, $w_{\infty}([A]) = 2$.

1.3 Πραγματική διαστηματική αριθμητική

Όταν χρησιμοποιούμε έναν υπολογιστή για να κάνουμε υπολογισμούς που περιλαμβάνουν πραγματικούς αριθμούς, αναγκαστικά χρησιμοποιούμε το πεπερασμένο σύνολο αριθμών κινητής υποδιαστολής που το υλικό μας παρέχει. Σε αυτή την περίπτωση υπάρχουν δύο

βασικές επιλογές για την προσέγγιση ενός πραγματικού αριθμού: είτε να χρησιμοποιήσουμε έναν floating-point αριθμό, είτε δύο floating-point αριθμούς οι οποίοι θα αποτελούν φράγματα για τον υπό προσέγγιση αριθμό. Η διαστηματική αριθμητική είναι βασισμένη στην τελευταία επιλογή. Με την εξασφάλιση ότι οποιαδήποτε στρογγυλοποίηση είναι εξωτερική, είναι εγγυημένο ότι το υπολογισμένο διάστημα περιέχει το σωστό αποτέλεσμα από μαθηματική άποψη.

Το σημαντικότερο χαρακτηριστικό της διαστηματικής αριθμητικής είναι ότι τα προκύπτοντα διαστήματα εγγυημένα περιέχουν το σύνολο όλων των πιθανών αποτελεσμάτων από οποιοδήποτε υπολογισμό μεταξύ διαστημάτων. Αυτό ισχύει, ακόμα και όταν εφαρμόζεται η διαστηματική αριθμητική σε έναν υπολογιστή χρησιμοποιώντας το πεπερασμένο σύνολο αριθμών κινητής υποδιαστολής που το υλικό μας παρέχει.

Επειδή ένα διάστημα αντιπροσωπεύει όλες τις τιμές που περιέχει, κατά συνέπεια αντιπροσωπεύει έναν άπειρο αριθμό τιμών. Το γεγονός αυτό που συνδέει τα διαστήματα με τα μαθηματικά, έτσι ώστε τα μη γραμμικά προβλήματα μπορούν να λυθούν αριθμητικά.

Ορισμός 1.3.1 Έστω $\star \in \{+, -, \times, \div\}$ μια διμελής πράξη επί του συνόλου των πραγματικών αριθμών $\mathbb{R}$. Αν $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, τότε

$$[a] \star [b] = \{a \star b \mid a \in [a], b \in [b]\} \quad (1.3.1)$$

ορίζει μια διμελή πράξη επί του συνόλου $\mathbb{IR}$.

Φυσικά, ο ορισμός του $[a] \div [b]$ περιορίζεται σε διαστήματα $[b]$ όπου $0 \notin [b]$. Παρατηρούμε ότι, αν τα διαστήματα $[a]$ και $[b]$ είναι εκφυλισμένα τότε οι πράξεις ανάγονται στην συνήθη αριθμητική μεταξύ πραγματικών αριθμών.

Από τον Ορισμό 1.3.1 είναι σαφές ότι το προκύπτον σύνολο είναι πάντα ένα κλειστό και φραγμένο διάστημα, αφού η συνάρτηση $f(x, y) = x \star y$, $\star \in \{+, -, \times, \div\}$ είναι συνεχής σε συμπαγή σύνολο και κατά συνέπεια λαμβάνει την μικρότερη και την μεγαλύτερη τιμή καθώς και όλες τις ενδιάμεσες τιμές και άρα το $[a] \star [b]$ είναι πάντα ένα διάστημα.

Η ακόλουθη πρόταση είναι ισοδύναμη με τον Ορισμό 1.3.1 και μας παρέχει αναλυτικούς κανόνες για την εφαρμογή των πράξεων μεταξύ διαστημάτων κάνοντας χρήση των ακραίων σημείων.

Πρόταση 1.3.1 (Διαστηματική αριθμητική) Για κάθε $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ ισχύει

$$[a] + [b] = [\underline{a} + \underline{b}, \bar{a} + \bar{b}], \quad (1.3.2)$$

$$[a] - [b] = [\underline{a} - \bar{b}, \bar{a} - \underline{b}], \quad (1.3.3)$$

$$[a] \times [b] = [\min\{\underline{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}\}, \max\{\underline{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}\}], \quad (1.3.4)$$

$$[a] \div [b] = [a] \times [1/\bar{b}, 1/\underline{b}], \text{ αν } 0 \notin [b]. \quad (1.3.5)$$

Από τον κανόνα (1.3.4), είναι φανερό ότι ένας πολλαπλασιασμός μεταξύ διαστημάτων απαιτεί τέσσερις πραγματικούς πολλαπλασιασμούς (καθώς επίσης και διάφορες συγκρίσεις). Ωστόσο, ο Moore [Μοο66] παρατήρησε ότι οι πολλαπλασιασμοί μπορούν να μειωθούν εξετάζοντας τα πρόσημα των άκρων των διαστημάτων $[a]$ και $[b]$. Έτσι προκύπτουν

$[a] \times [b]$	$0 \leq \underline{b}$	$\underline{b} < 0 < \bar{b}$	$\bar{b} \leq 0$
$0 \leq \underline{a}$	$[\underline{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}]$	$[\bar{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}]$	$[\bar{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}]$
$\underline{a} < 0 < \bar{a}$	$[\underline{a}\bar{b}, \bar{a}\bar{b}]$	$[\min\{\underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}\}, \max\{\underline{a}\underline{b}, \bar{a}\bar{b}\}]$	$[\bar{a}\underline{b}, \underline{a}\bar{b}]$
$\bar{a} \leq 0$	$[\underline{a}\bar{b}, \bar{a}\underline{b}]$	$[\underline{a}\bar{b}, \underline{a}\bar{b}]$	$[\bar{a}\bar{b}, \underline{a}\bar{b}]$

Πίνακας 1.1. Πολλαπλασιασμός διαστημάτων $[a] \times [b]$

$[a]/[b]$	$0 < \underline{b}$	$\bar{b} < 0$
$0 \leq \underline{a}$	$[\underline{a}/\bar{b}, \bar{a}/\underline{b}]$	$[\bar{a}/\bar{b}, \underline{a}/\underline{b}]$
$\underline{a} < 0 < \bar{a}$	$[\underline{a}/\underline{b}, \bar{a}/\underline{b}]$	$[\bar{a}/\bar{b}, \underline{a}/\bar{b}]$
$\bar{a} \leq 0$	$[\underline{a}/\underline{b}, \bar{a}/\bar{b}]$	$[\bar{a}/\underline{b}, \underline{a}/\bar{b}]$

Πίνακας 1.2. Διαίρεση διαστημάτων $[a]/[b]$ με $0 \notin [b]$

εννέα περιπτώσεις, όπου μόνο σε μια περίπτωση απαιτούνται τέσσερις πολλαπλασιασμοί ενώ στις υπόλοιπες περιπτώσεις απαιτούνται ακριβώς δύο (βλέπε Πίνακα 1.1).

Ακολουθώντας την ίδια μεθοδολογία (ελέγχοντας τα πρόσημα των άκρων), μπορούμε να εξάγουμε κανόνες για την διαίρεση $[a]/[b]$, όπου $0 \notin [b]$. Στον Πίνακα 1.2 παρουσιάζονται οι έξι περιπτώσεις και είναι φανερό ότι για τον υπολογισμό του αποτελέσματος αρκούν σε κάθε περίπτωση ακριβώς δύο διαιρέσεις μεταξύ πραγματικών αριθμών σε αντίθεση με τον κανόνα (1.3.5) που απαιτεί τέσσερις διαιρέσεις.

Παράδειγμα 1.3.1 *Κάνοντας χρήση της Πρότασης 1.3.1, μπορούμε να υπολογίσουμε τα αποτελέσματα των κάτωθι πράξεων*

$$\begin{array}{llll}
[-1, 0] + [0, \pi] & = & [-1, \pi] & [-1, -1] \times [2, 5] = [-5, 2] \\
[1, 4] - [1, 4] & = & [-3, 3] & [-2, 3] \times [-2, 3] = [-6, 9] \\
[\frac{1}{2}, 1] - [0, \frac{1}{6}] & = & [\frac{1}{3}, 1] & [1, \sqrt{2}] \times [-1, 1] = [-\sqrt{2}, \sqrt{2}] \\
[2, 4] - [3, 3] & = & [-1, 1] & [1, 2] \div [-2, -1] = [-2, -\frac{1}{2}].
\end{array}$$

1.3.1 Βασικές αλγεβρικές ιδιότητες

Αν $[a]$ και $[b]$ είναι εκφυλισμένα διαστήματα, τότε οι ισότητες (1.3.2), (1.3.3), (1.3.4) και (1.3.5) ανάγονται στην συνήθη αριθμητική μεταξύ πραγματικών αριθμών. Επομένως, μπορούμε να θεωρήσουμε την διαστηματική αριθμητική ως γενίκευση της πραγματικής αριθμητικής που όλοι γνωρίζουμε. Κατά συνέπεια, είναι λογικό να περιμένουμε ότι οι ιδιότητες της διαστηματικής αριθμητικής θα είναι παρόμοιες με αυτές της πραγματικής αριθμητικής. Ωστόσο, υπάρχουν πολλές σημαντικές διαφορές μεταξύ τους τις οποίες και θα δούμε στην συνέχεια.

Δυστυχώς, η αλγεβρική δομή $(\mathbb{IR}, +, \cdot)$ δεν είναι ούτε σώμα ούτε δακτύλιος. Οι δομές $(\mathbb{IR}, +)$ και $(\mathbb{IR}/\{0\}, \cdot)$ είναι αβελιανές ημιομάδες με ουδέτερα στοιχεία $[0, 0]$ και

$[1, 1]$, αντίστοιχα, αλλά δεν είναι ομάδες. Άρα, για κάθε $[a], [b], [c] \in \mathbb{IR}$ έχουμε αντίστοιχα τις ιδιότητες

$$\begin{aligned} ([a] + [b]) + [c] &= [a] + ([b] + [c]), & ([a] \times [b]) \times [c] &= [a] \times ([b] \times [c]) \\ [a] + [b] &= [b] + [a], & [a] \times [b] &= [b] \times [a] \\ [0, 0] + [a] &= [a], & [1, 1] \times [a] &= [a]. \end{aligned}$$

Επιπλέον, αφού $(\mathbb{IR}, +)$ και $(\mathbb{IR}/\{0\}, \cdot)$ είναι αβελιανές ημιομάδες, ένα μη εκφυλισμένο διάστημα $[a]$ δεν έχει αντίστροφο στοιχείο αναφορικά με την πρόσθεση ή τον πολλαπλασιασμό, δηλαδή,

$$[a] - [a] \neq 0 \quad \text{και} \quad [a]/[a] \neq 1$$

όταν $w([a]) > 0$. Πράγματι, $[a] - [a] = [\underline{a} - \bar{a}, \bar{a} - \underline{a}] = w([a])[-1, 1]$ και $[a]/[a] = [\underline{a}/\bar{a}, \bar{a}/\underline{a}]$ όταν $[a] > 0$ ή $[a]/[a] = [\bar{a}/\underline{a}, \underline{a}/\bar{a}]$ όταν $[a] < 0$.

Παρατήρηση. Εφόσον τα στοιχεία του $\mathbb{IR}$ δεν έχουν αντίθετο στοιχείο ως προς την πρόσθεση, το $\mathbb{IR}^n$ δεν είναι διανυσματικός χώρος.

Ο επιμεριστικός νόμος

$$[a]([b] + [c]) = [a][b] + [a][c] \quad (1.3.6)$$

δεν ισχύει πάντα. Για παράδειγμα, έχουμε ότι

$$[-1, 1](1 + (-1)) = 0 \subset [-1, 1] \cdot 1 + [-1, 1] \cdot (-1) = [-2, 2].$$

Ωστόσο, πάντα ισχύει η ακόλουθη ιδιότητα την οποία καλούμε *υποεπιμεριστική*.

$$[a] \cdot ([b] + [c]) \subseteq [a] \cdot [b] + [a] \cdot [c]. \quad (1.3.7)$$

Πράγματι, αν $t \in [a]([b] + [c])$ συνεπάγεται ότι $t = a(b + c)$ όπου $a \in [a], b \in [b], c \in [c]$. Αν τώρα, $ab \in [a][b], ac \in [a][c]$ έχουμε ότι $t = ab + ac \in [a][b] + [a][c]$, που αποδεικνύει την (1.3.7).

Είναι σημαντικό να παρατηρήσουμε ότι $w([a]([b] + [c])) \leq w([a][b] + [a][c])$. Επομένως, συμφέρει πάντα να χρησιμοποιούμε την παραγοντοποιημένη μορφή $[a]([b] + [c])$ αντί της $[a][b] + [a][c]$ εφόσον η χρήση της πρώτης οδηγεί, εν γένει, σε διαστήματα μικρότερου πλάτους. Γι' αυτό το λόγο θα πρέπει να είμαστε ιδιαίτερα προσεκτικοί όταν αναπαριστούμε διαστηματικές συναρτήσεις όταν θέλουμε να εκτιμήσουμε το πεδίο τιμών τους (βλέπε ενότητα 1.6).

Ωστόσο, έχει αποδειχτεί από τον Ris [Ris72] ότι υπάρχουν περιπτώσεις όπου ο επιμεριστικός κανόνας (1.3.6) ισχύει: *i)* αν το διάστημα $[a]$ είναι εκφυλισμένο, *ii)* αν $[b][c] \geq 0$, και *iii)* αν τα διαστήματα $[b]$ και $[c]$ είναι συμμετρικά.

Μια άλλη χαρακτηριστική ιδιότητα της διαστηματικής αριθμητικής είναι η *μονότονη έγκλειση*:

Θεώρημα 1.3.1 Έστω $[a] \subseteq [a'], [b] \subseteq [b']$, και $\star \in \{+, -, \times, \div\}$, τότε

$$[a] \star [b] \subseteq [a'] \star [b'],$$

όπου $0 \notin [b']$ για την πράξη της διαίρεσης.

Μολονότι, η απόδειξη του παραπάνω θεωρήματος μπορεί να δοθεί σε μια γραμμική θεωρείται από τα πιο βασικά θεωρήματα. Το θεώρημα μας εξασφαλίζει ότι οι τέσσερις πράξεις της διαστηματικής αριθμητικής είναι μονότονα εγγλεισμένες γεγονός που μας δίνει την δυνατότητα να επεκτείνουμε τις πραγματικές συναρτήσεις στο χώρο των διαστημάτων προκειμένου να ορίσουμε συναρτήσεις εγγλεισμού για το πεδίο τιμών.

1.3.2 Το πρόβλημα της εξάρτησης

Όταν μια δοθείσα μεταβλητή (διάστημα) εμφανίζεται περισσότερες από μια φορές σε έναν υπολογισμό με διαστήματα, σε κάθε εμφάνισή της συμπεριφέρεται ως μια διαφορετική μεταβλητή. Είδαμε ήδη ότι το αποτέλεσμα της πράξης $[x] - [x]$ είναι διάφορο του διαστήματος $[0, 0]$. Αυτό συμβαίνει γιατί η διαστηματική αριθμητική υπολογίζει το σύνολο $\{x - y \mid x \in [x], y \in [x]\}$ αντί του συνόλου $\{x - x \mid x \in [x]\}$. Δηλαδή στην έκφραση $[x] - [x]$ είναι σαν να έχουμε $[x] - [y]$, όπου το διάστημα $[y]$ είναι ίσο αλλά ανεξάρτητο του διαστήματος $[x]$. Το φαινόμενο αυτό καλείται *πρόβλημα της εξάρτησης* (dependency problem). Σημειώνουμε ότι αν μια μεταβλητή διάστημα εμφανίζεται μόνο μια φορά σε μια δοθείσα παράσταση, τότε δεν υφίσταται το πρόβλημα της εξάρτησης και επομένως το αποτέλεσμα του υπολογισμού με χρήση διαστηματικής αριθμητικής είναι ακριβής.

Παράδειγμα 1.3.2 Έστω ότι $[x] = [0, 1]$ και $[y] = [1, 2]$. Θέλουμε να υπολογίσουμε το αποτέλεσμα της παράστασης $\frac{[x]-[y]}{[x]+[y]}$. Εφόσον οι μεταβλητές $[x]$ και $[y]$ εμφανίζονται πάνω από μια φορά είναι αναμενόμενο να έχουμε πρόβλημα εξάρτησης. Πράγματι, αντικαθιστώντας έχουμε

$$\frac{[x] - [y]}{[x] + [y]} = \frac{[0, 1] - [1, 2]}{[0, 1] + [1, 2]} = \frac{[-2, 0]}{[1, 3]} = [-2, 0]$$

Ωστόσο, για την συγκεκριμένη παράσταση μπορούμε να άρουμε το πρόβλημα της εξάρτησης αν την γράψουμε στην ισοδύναμη μορφή $1 - \frac{2}{1+\frac{[x]}{[y]}}$, από την οποία προκύπτει το σωστό αποτέλεσμα $[-1, 0] \subseteq [-2, 0]$.

1.3.3 Ο κανόνας της διαγραφής

Ο κανόνας της διαγραφής (cancellation rule) αποτελεί μια λύση στο πρόβλημα της εξάρτησης που παρουσιάζεται κατά τον υπολογισμό παραστάσεων της μορφής $[x] - [x] \neq 0$. Έτσι, αν $[x] = [\underline{x}, \bar{x}]$ και $[y] = [\underline{y}, \bar{y}]$ δύο διαστηματικοί αριθμοί, ο κανόνας της διαγραφής ορίζεται ως εξής:

$$[x] \setminus [y] = [\underline{x} - \underline{y}, \bar{x} - \bar{y}]. \quad (1.3.8)$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι ο κανόνας (1.3.8) δεν μπορεί να αντικαταστήσει την πράξη της αφαίρεσης εκτός από ειδικές περιπτώσεις. Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι δοθέντος των διαστημάτων $[x]_j, j = 1, \dots, n$, θέλουμε να υπολογίσουμε τα αθροίσματα

$$[s]_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n [x]_j, \quad i = 1, \dots, n.$$

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε υπολογίσει το πρώτο άθροισμα $[s]_1 = [x]_2 + [x]_3 + \dots + [x]_n$ και θέλουμε να υπολογίσουμε το $[s]_2 = [x]_1 + [x]_3 + \dots + [x]_n$. Παρατηρούμε ότι $[s]_2 =$

$([s]_1 + [x]_1) - [x]_2$. Επομένως, μπορούμε να υπολογίσουμε το $[s]_2$ πολύ απλά προσθέτοντας το $[x]_1$ στο άθροισμα $[s]_1$ και διαγράφοντας το $[x]_2$ από το αποτέλεσμα με αφαίρεση. Αλλά, $[x]_2 - [x]_2 \neq 0$. Συνεπώς, δεν μπορούμε να διαγράψουμε το $[x]_2$ από το $[s]_1$ με μια απλή αφαίρεση (εκτός κι αν το $[x]_2$ είναι εκφυλισμένο). Σε αυτή την περίπτωση επιβάλλεται ο κανόνας της διαγραφής, ο οποίος και μας δίνει το σωστό αποτέλεσμα, αφού $[x]_2 \setminus [x]_2 = [0, 0] = 0$.

1.4 Επεκταμένη διαστηματική αριθμητική

Σύμφωνα με τον Ορισμό 1.3.1 της διαστηματικής αριθμητικής, δεν μπορούμε να διαιρέσουμε με ένα διάστημα το οποίο περιέχει το μηδέν. Ωστόσο, η περίπτωση αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη σε πολλές εφαρμογές της διαστηματικής ανάλυσης, όπως, η εύρεση όλων των λύσεων ενός μη γραμμικού συστήματος (διαστηματική μέθοδος Newton) καθώς και στο πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης. Η χρήση της *επεκταμένης διαίρεσης*, όπως καλείται, αποσκοπεί στην άμεση απαλοιφή τμημάτων της περιοχής αναζήτησης όπου δεν περιέχεται λύση. Γ' αυτό το σκοπό, θα πρέπει να είναι εφικτός ο υπολογισμός εκφράσεων της μορφής

$$\mathcal{W} = r - \frac{[a]}{[b]}, \quad (1.4.1)$$

όπου $r \in \mathbb{R}$ και $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, ανεξάρτητα αν το διάστημα $[b]$ περιέχει το 0 ή όχι. Το σύνολο $\mathcal{W}$ χρησιμοποιείται ως ενδιαμέσο αποτέλεσμα όπου μετά από τομή με κάποιο πεπερασμένο διάστημα προκύπτει και πάλι ένα διάστημα. Επομένως, το βασικό πρόβλημα μπορεί να τεθεί ως εξής [Rat96]: Να υπολογιστεί το σύνολο $\mathcal{W}$ όλων των λύσεων w της εξίσωσης

$$b \cdot (r - w) = a, \quad \text{για κάθε } a \in [a] \text{ και } b \in [b]. \quad (1.4.2)$$

1.4.1 Επεκταμένη διαστηματική διαίρεση

Από τον ορισμό της διαστηματικής διαίρεσης (1.3.5) με $0 \notin [b]$, έχουμε ότι το πηλίκο $[a]/[b] = [a] \cdot [1/\bar{b}, 1/\underline{b}]$ είναι το σύνολο

$$\mathcal{S}([a], [b]) = \{c \in \mathbb{R} \mid c = a/b, a \in [a], b \in [b]\}. \quad (1.4.3)$$

Αν όμως $0 \in [b]$, δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον παραπάνω ορισμό επειδή το $a/0$ δεν ορίζεται. Επιστρέφοντας στο αρχικό πρόβλημα (1.4.2), η διαίρεση του $[a]/[b]$ μπορεί να ερμηνευτεί ως η εύρεση όλων των σημείων c έτσι ώστε $b \cdot c = a$ για κάθε $a \in [a]$ και $b \in [b]$.

Ορισμός 1.4.1 Εστω $[a], [b] \in \mathbb{IR}$. Ορίζουμε ως επεκταμένο σύνολο λύσεων του πηλίκου $[a]/[b]$, το σύνολο

$$\mathcal{S}^*([a], [b]) = \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, a \in [a], b \in [b]\}. \quad (1.4.4)$$

Λήμμα 1.4.1 Για κάθε $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ με $0 \notin [b]$, ισχύει ότι $[a]/[b] = \mathcal{S}([a], [b]) = \mathcal{S}^*([a], [b])$.

Για να δούμε πως μπορούμε να παράγουμε τους κανόνες της επεκταμένης διαίρεσης κάνοντας χρήση του Ορισμού 1.4.1, ας δούμε πρώτα ένα παράδειγμα

Παράδειγμα 1.4.1 Έστω $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ με $[a] = [4, 5]$ και $[b] = [-1, 2]$. Εφόσον $0 \notin [4, 5]$, δεν υπάρχει $a \notin [4, 5]$ για το οποίο να υπάρχει ένα $c \in \mathbb{R}$ τέτοιο ώστε $0 \cdot c = 0 = a$. Επομένως, μπορούμε να εξαιρέσουμε το 0 από το $[b]$, οπότε έχουμε

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^*([a], [b]) &= \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, \quad a \in [4, 5], b \in [-1, 0) \cup (0, 2)\} \\ &= \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, \quad a \in [4, 5], b \in [-1, 0)\} \cup \\ &\quad \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, \quad a \in [4, 5], b \in (0, 2]\}. \end{aligned}$$

Έστω $\varepsilon > 0$, θέτοντας

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\varepsilon^*([a], [b]) &= \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, \quad x \in [4, 5], y \in [-1, -\varepsilon]\} \\ &\cup \{c \in \mathbb{R} \mid b \cdot c = a, \quad x \in [4, 5], y \in [\varepsilon, 2]\}. \end{aligned}$$

έχουμε ότι $\mathcal{S}_\varepsilon^*([a], [b]) \longrightarrow \mathcal{S}^*([a], [b])$ όταν $\varepsilon \rightarrow 0$. Επομένως,

$$\mathcal{S}_\varepsilon^*([a], [b]) = [-5/\varepsilon, -4] \cup [2, 5/\varepsilon] \longrightarrow [-\infty, -4] \cup [2, +\infty] = \mathcal{S}^*([a], [b]),$$

και άρα, το αποτέλεσμα της διαίρεσης $[a]/[b]$ είναι η ένωση δύο επεκταμένων πραγματικών διαστημάτων.

Από το παραπάνω παράδειγμα είναι φανερό ότι είναι απαραίτητο να επεκτείνουμε το σύνολο των πραγματικών διαστημάτων θεωρώντας τα δύο κατ' εκδοχή σύμβολα $-\infty$ και $+\infty$. Έτσι, ορίζουμε το επεκταμένο σύνολο των διαστηματικών αριθμών ως

$$\mathbb{IR}^* := \mathbb{IR} \cup \{[-\infty, r], r \in \mathbb{R}\} \cup \{[r, +\infty], r \in \mathbb{R}\} \cup \{[-\infty, +\infty], \}.$$

Επίσης, θα συμβολίζουμε το κενό διάστημα με $[\emptyset]$ όπου $[\emptyset] \subseteq [a]$ για κάθε $[a] \in \mathbb{IR}^* \cup \{[\emptyset]\}$.

Ορισμός 1.4.2 Για πεπερασμένα διαστήματα $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, ορίζουμε την επεκταμένη διαστηματική διαίρεση σύμφωνα με τον κάτωθι κανόνα

$$[a]/[b] = \begin{cases} [a] \cdot [1/\bar{b}, 1/\underline{b}] & \text{αν } 0 \notin [b], \\ [-\infty, +\infty] & \text{αν } 0 \in [a] \text{ και } 0 \in [b], \\ [\bar{a}/\underline{b}, +\infty] & \text{αν } \bar{a} < 0 \text{ και } \underline{b} < \bar{b} = 0, \\ [-\infty, \bar{a}/\bar{b}] \cup [\bar{a}/\underline{b}, +\infty] & \text{αν } \bar{a} < 0 \text{ και } \underline{b} < 0 < \bar{b}, \\ [-\infty, \bar{a}/\bar{b}] & \text{αν } \bar{a} < 0 \text{ και } 0 = \underline{b} < \bar{b}, \\ [-\infty, \underline{a}/\underline{b}] & \text{αν } 0 < \underline{a} \text{ και } \underline{b} < \bar{b} = 0, \\ [-\infty, \underline{a}/\underline{b}] \cup [\underline{a}/\bar{b}, +\infty] & \text{αν } 0 < \underline{a} \text{ και } \underline{b} < 0 < \bar{b}, \\ [\underline{a}/\bar{b}, +\infty] & \text{αν } 0 < \underline{a} \text{ και } 0 = \underline{b} < \bar{b}, \\ [\emptyset] & \text{αν } 0 \notin [a] \text{ και } 0 = [b]. \end{cases} \quad (1.4.5)$$

Θεώρημα 1.4.1 ([Rat96]) Για $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, το αποτέλεσμα της επεκταμένης διαστηματικής διαίρεσης σύμφωνα με τον Ορισμό 1.4.2 ικανοποιεί την εξίσωση $[a]/[b] = \mathcal{S}^*([a], [b])$.

Θεώρημα 1.4.2 ([Rat96]) Η επεκταμένη διαστηματική διαίρεση σύμφωνα με τον Ορισμό 1.4.2 είναι μονότονα εγκλεισμένη.

Παράδειγμα 1.4.2 Σε συνέχεια του Παραδείγματος 1.4.1, έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την παράσταση $([a]/[b]) \cap [-5, 4]$. Το αποτέλεσμα της επεκταμένης διαίρεσης είναι $[-\infty, -4] \cup [2, +\infty]$. Η τομή με το διάστημα $[-5, 4]$ παράγει δύο πεπερασμένα διαστήματα $[-5, -4] \cup [2, 4]$. Ομοίως, $([a]/[b]) \cap [-2, 4] = [2, 4]$, και $([a]/[b]) \cap [-3, 1] = [\emptyset]$.

1.4.2 Επεκταμένη διαστηματική αφαίρεση

Ορισμός 1.4.3 Έστω $r \in \mathbb{R}$ και $[c] \in \mathbb{IR}^* \cup \{[\emptyset]\}$. Τότε, το σύνολο

$$\mathcal{W}^*(r, [c]) = \{w \in \mathbb{R} \mid w = r - c, c \in [c]\} \quad (1.4.6)$$

καλείται επεκταμένο σύνολο λύσεων της αφαίρεσης $r - [c]$.

Ορισμός 1.4.4 Έστω $r \in \mathbb{R}$ και $[c] \in \mathbb{IR}^* \cup \{[\emptyset]\}$, ορίζουμε την επεκταμένη διαστηματική αφαίρεση ως ακολούθως

$$r - [c] = \begin{cases} [r - \bar{c}, r - \underline{c}] & \text{αν } [c] \in \mathbb{IR}, \\ [-\infty, +\infty] & \text{αν } [c] = [-\infty, +\infty], \\ [-\infty, r - \underline{c}] & \text{αν } [c] = [\underline{c}, +\infty], \\ [r - \bar{c}, +\infty] & \text{αν } [c] = [-\infty, \bar{c}], \\ [\emptyset] & \text{αν } [c] = [\emptyset]. \end{cases} \quad (1.4.7)$$

Θεώρημα 1.4.3 ([Rat96]) Έστω $r \in \mathbb{R}$ και $[c] \in \mathbb{IR}^* \cup \{[\emptyset]\}$, τότε σύμφωνα με τον Ορισμό 1.4.4, το αποτέλεσμα της επεκταμένης διαστηματικής αφαίρεσης ικανοποιεί την εξίσωση: $r - [c] = \mathcal{W}^*(r, [c])$.

Θεώρημα 1.4.4 ([Rat96]) Η επεκταμένη διαστηματική αφαίρεση σύμφωνα με τον Ορισμό 1.4.4 είναι μονότονα εγκλεισμένη.

1.5 Τοπολογία επί του συνόλου των διαστημάτων

Ορισμός 1.5.1 (Απόσταση) Η απόσταση δύο διαστημάτων $[a], [b] \in \mathbb{IR}$ ορίζεται ως

$$q([a], [b]) = \max \{ |\underline{a} - \underline{b}|, |\bar{a} - \bar{b}| \}.$$

Ενώ για διαστηματικά διανύσματα $[a], [b] \in \mathbb{IR}^n$

$$\hat{q}([a], [b]) = \max_{i=1, \dots, n} q([a_i], [b_i]).$$

Η απόσταση ανάγεται στην συνήθη απόσταση πραγματικών αριθμών όταν εφαρμοστεί για εκφυλισμένα διαστήματα, δηλ. $q([a, a], [b, b]) = |a - b|$.

Θεώρημα 1.5.1 Η συνάρτηση $\hat{q} : \mathbb{IR}^n \times \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ορίζει μια μετρική επί του συνόλου $\mathbb{IR}^n$.

Απόδειξη. Αρκεί να δείξουμε ότι για κάθε $[x], [y] \in \mathbb{IR}^n$ ισχύουν οι ακόλουθες τρεις ιδιότητες:

α) $\hat{q}([x], [y]) \geq 0$, και $\hat{q}([x], [y]) = 0$ αν και μόνο αν $[x] = [y]$.

β) $\hat{q}([x], [y]) = \hat{q}([y], [x])$.

γ) $\hat{q}([x], [y]) \leq \hat{q}([x], [z]) + \hat{q}([y], [z])$.

Οι ιδιότητες (α) και (β) προκύπτουν από τον Ορισμό 1.5.1, απομένει να αποδείξουμε την τριγωνική ανισότητα (γ). Έστω $[x], [y], [z] \in \mathbb{IR}^n$ και έστω $\hat{i} \in \{1, \dots, n\}$ τέτοιο ώστε $\hat{q}([x], [y]) = q([x_{\hat{i}}], [y_{\hat{i}}])$. Ας θέσουμε $\chi = [x_{\hat{i}}]$, $\psi = [y_{\hat{i}}]$, $\zeta = [z_{\hat{i}}]$. Επειδή

$$q(\chi, \zeta) + q(\psi, \zeta) \leq \hat{q}([x], [z]) + \hat{q}([y], [z])$$

αρκεί να δείξουμε ότι

$$q(\chi, \psi) \leq q(\chi, \zeta) + q(\psi, \zeta).$$

$$\begin{aligned} q(\chi, \zeta) + q(\psi, \zeta) &= \max\{|\bar{\chi} - \bar{\zeta}|, |\underline{\chi} - \underline{\zeta}|\} + \max\{|\bar{\psi} - \bar{\zeta}|, |\underline{\psi} - \underline{\zeta}|\} \\ &\geq \max\{|\bar{\chi} - \bar{\zeta}| + |\bar{\psi} - \bar{\zeta}|, |\underline{\chi} - \underline{\zeta}| + |\underline{\psi} - \underline{\zeta}|\} \\ &\geq \max\{|\bar{\chi} - \bar{\psi}|, |\underline{\chi} - \underline{\psi}|\} \\ &= q(\chi, \psi). \end{aligned}$$

■

Ορισμός 1.5.2 (Ανοικτά υποσύνολα του $\mathbb{IR}^n$) Ένα σύνολο $\mathcal{S} \subseteq \mathbb{IR}^n$ είναι ανοικτό στο $\mathbb{IR}^n$ εάν για κάθε $[x] \in \mathcal{S}$ υπάρχει πραγματικός αριθμός $\epsilon > 0$ τέτοιος ώστε

$$\{[y] \in \mathbb{IR}^n \mid \hat{q}([x], [y]) \leq \epsilon\} \subseteq \mathcal{S}.$$

Θεώρημα 1.5.2 Έστω $\mathcal{O}_n$ το σύνολο των ανοικτών υποσυνόλων του $\mathbb{IR}^n$. Τότε το $(\mathbb{IR}^n, \mathcal{O}_n)$ είναι τοπολογικός χώρος.

Απόδειξη. Βλέπε [Arm83].

■

Στην συνέχεια, όταν γράφουμε $\mathbb{IR}^n$ θα εννοούμε τον τοπολογικό χώρο $(\mathbb{IR}^n, \mathcal{O}_n)$.

Θεώρημα 1.5.3 Μια διαστηματική ακολουθία $\{[x]^{(k)}\} \in \mathbb{IR}^n$ συγκλίνει στο $[x] \in \mathbb{IR}^n$ αν και μόνο αν

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \underline{x}_i^{(k)} = \underline{x}_i \text{ και } \lim_{k \rightarrow \infty} \bar{x}_i^{(k)} = \bar{x}_i \text{ για κάθε } i = 1, \dots, n.$$

Απόδειξη. Έστω ότι η ακολουθία $\{[x]^{(k)}\}$, $k = 1, 2, \dots$ συγκλίνει στο διάστημα $[x]$. Έστω $i \in \{1, \dots, n\}$ και $\epsilon > 0$ σταθερό. Τότε υπάρχει $k_\epsilon \in \mathbb{N}$ τέτοιο ώστε $q([x_i]^{(k)}, [x_i]) < \epsilon$ για κάθε $k \geq k_\epsilon$. Επομένως, $|\sup[x_i]^{(k)} - \sup[x_i]| < \epsilon$ και $|\inf[x_i]^{(k)} - \inf[x_i]| < \epsilon$ για όλα τα $k \geq k_\epsilon$. Απ' όπου συνεπάγεται ότι $\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{x}_i^{(k)} = \bar{x}_i$ και $\lim_{k \rightarrow \infty} \underline{x}_i^{(k)} = \underline{x}_i$.

Αντίστροφα, υποθέτουμε ότι η ακολουθία $\sup\{[x_i]^{(k)}\}$ συγκλίνει στο $\sup[x_i]$ ενώ η ακολουθία $\inf\{[x_i]^{(k)}\}$ συγκλίνει στο $\inf[x_i]$ για $i = 1, 2, \dots$ και έστω $\epsilon > 0$ σταθερό. Τότε υπάρχει $k_\epsilon \in \mathbb{N}$ τέτοιο ώστε $|\sup[x_i]^{(k)} - \sup[x_i]| < \epsilon$ και $|\inf[x_i]^{(k)} - \inf[x_i]| < \epsilon$ για όλα τα i και $k \geq k_\epsilon$. Συνεπώς, $\hat{q}([x]^{(k)}, [x]) < \epsilon$ για κάθε $k \geq k_\epsilon$, άρα $\lim_{k \rightarrow \infty} [x]^{(k)} = [x]$. ■

Ορισμός 1.5.3 (Φωλιασμένη ακολουθία) Μια διαστηματική ακολουθία $\{[x]^{(k)}\} \in \mathbb{IR}^n$, $k = 1, 2, \dots$, θα καλείται φωλιασμένη εάν

$$[x]^{(k+1)} \subseteq [x]^{(k)} \text{ για κάθε } k \geq 1.$$

Θεώρημα 1.5.4 Οποιαδήποτε φωλιασμένη διαστηματική ακολουθία $\{[x]^{(k)}\} \in \mathbb{IR}^n$, $k = 1, 2, \dots$, είναι συγκλίνουσα.

Απόδειξη. Έστω $\{[x]^{(k)}\}$ μία φωλιασμένη ακολουθία. Σύμφωνα με το Θεώρημα 1.5.3 αρκεί να δείξουμε ότι

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \underline{x}_i^{(k)} = \underline{x}_i \text{ και } \lim_{k \rightarrow \infty} \overline{x}_i^{(k)} = \overline{x}_i \text{ για κάθε } i = 1, \dots, n.$$

Έστω $i \in \{1, \dots, n\}$ αυθαίρετο αλλά σταθερό. Προφανώς η ακολουθία $\{[x_i]^{(k)}\}$ είναι φωλιασμένη. Επομένως, η πραγματική ακολουθία των κάτω φραγμάτων $\{\underline{x}_i^{(k)}\}$ είναι μονότονη, μη φθίνουσα, φραγμένη από πάνω από το $\overline{x}_i^{(1)}$ και άρα έχει όριο $\underline{x}_i \in \mathbb{R}$. Ομοίως, $\{\overline{x}_i^{(k)}\}$ είναι μονότονη, μη αύξουσα ακολουθία πραγματικών αριθμών, φραγμένη από κάτω από το $\underline{x}_i^{(1)}$ και άρα έχει όριο $\overline{x}_i \in \mathbb{R}$. Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\underline{x}_i^{(k)} \leq \overline{x}_i^{(k)}$ για κάθε k , ισχύει ότι $\underline{x}_i \leq \overline{x}_i$, επομένως η ακολουθία $\{[x_i]^{(k)}\}$ συγκλίνει στο διάστημα $[\underline{x}_i, \overline{x}_i]$. ■

1.6 Διαστηματικές συναρτήσεις

Οι διαστηματικές συναρτήσεις (interval functions) είναι συναρτήσεις που απεικονίζουν διαστήματα σε διαστήματα. Μπορούμε να διακρίνουμε δύο είδη διαστηματικών συναρτήσεων, τις *εκφυλισμένες* και τις *μη εκφυλισμένες*. Ας υποθέσουμε ότι ο τύπος της συνάρτησης περιέχει μόνο πραγματικούς αριθμούς ως παραμέτρους, τότε, όταν τα ορίσματα της συνάρτησης είναι διαστήματα μηδενικού πλάτους, η τιμή της συνάρτησης θα είναι ένα εκφυλισμένο διάστημα μηδενικού πλάτους. Θα ονομάζουμε μια τέτοια διαστηματική συνάρτηση *εκφυλισμένη*. Σε αντίθετη περίπτωση, δηλαδή, αν η συνάρτηση περιέχει ως παραμέτρους διαστήματα, η τιμή της συνάρτησης είναι ένα διάστημα. Μια τέτοια διαστηματική συνάρτηση καλείται *μη εκφυλισμένη*. Για παράδειγμα, η συνάρτηση $F([x]) = [x] + [1, 2]$ είναι προφανώς μη εκφυλισμένη, διότι για $[x] = [0, 0]$ λαμβάνουμε ως αποτέλεσμα το μη εκφυλισμένο διάστημα $[1, 2]$.

Στην συνέχεια οι διαστηματικές συναρτήσεις θα συμβολίζονται με κεφαλαία γράμματα.

Ορισμός 1.6.1 Μια διαστηματική συνάρτηση $F : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ καλείται *μονότονα εγκλεισμένη* (inclusion monotone) εάν για κάθε $[x] \subseteq [y] \in \mathbb{IR}^n$ ισχύει

$$F([x]) \subseteq F([y]). \quad (1.6.1)$$

Ο παραπάνω ορισμός προκύπτει άμεσα από το γεγονός ότι η διαστηματική αριθμητική είναι μονότονα εγκλεισμένη (Θεώρημα 1.3.1) ακόμα και όταν εμφανίζονται εξωτερικές στρογγυλοποιήσεις. Επιπλέον, η σύνθεση μονότονων εγκλεισμένων συναρτήσεων είναι μονότονα εγκλεισμένη, δηλαδή, αν $F : \mathbb{IR}^m \rightarrow \mathbb{IR}$ και $G_i : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$, $i = 1, \dots, m$ είναι μονότονα εγκλεισμένες, τότε και η $F(G_1, \dots, G_m) : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ είναι μονότονα εγκλεισμένη.

Αξίζει να σημειωθεί ότι δεν είναι όλες οι διαστηματικές συναρτήσεις μονότονα εγκλεισμένες. Για παράδειγμα, οι συναρτήσεις μικρότερης και μεγαλύτερης απόλυτης τιμής ($\text{mig}([x])$ και $\text{mag}([x])$), η συνάρτηση πλάτους διαστήματος $w([x])$ και η συνάρτηση $m([x])$

δεν είναι μονότονα εγκλεισμένες. Αυτό συμβαίνει γιατί οι παραπάνω συναρτήσεις είναι διαστηματικές συναρτήσεις πραγματικής τιμής, σε αντίθεση με την συνάρτηση απόλυτης τιμής $abs([x])$, η οποία είναι μονότονα εγκλεισμένη.

Παράδειγμα 1.6.1 Θεωρούμε την συνάρτηση $F([x]) = m([x]) + \frac{1}{2}([x] - m([x]))$. Η διαστηματική συνάρτηση $F([x])$ δεν είναι μονότονα εγκλεισμένη (λόγω της συνάρτησης $m([x])$). Έστω $[x] = [0, 1]$ και $[y] = [0, 2]$, τότε $F([x]) = [\frac{1}{4}, \frac{3}{4}]$ και $F([y]) = [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$. Άρα, για $[x] \subseteq [y]$ έχουμε ότι $F([x]) \not\subseteq F([y])$.

Ορισμός 1.6.2 (Συνεχής συνάρτηση) Μια διαστηματική συνάρτηση $F : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ είναι συνεχής στο $[x] \in \mathbb{IR}^n$ εάν

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F([x]^{(k)}) \subseteq F([x])$$

για κάθε διαστηματική ακολουθία $\{[x]^{(k)}\} \in \mathbb{IR}^n$, $k = 1, 2, \dots$, που συγκλίνει στο $[x] \in \mathbb{IR}^n$. Η διαστηματική συνάρτηση F είναι συνεχής αν η F συνεχής σε κάθε $[x] \in \mathbb{IR}^n$.

Ορισμός 1.6.3 (Lipschitz συνάρτηση) Έστω $[x] \in \mathbb{IR}^n$. Ο πραγματικός αριθμός $\lambda_{F,[x]}$ καλείται σταθερά Lipschitz της συνάρτησης $F : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ στο διάστημα $[x]$ εάν για κάθε $[y] \subseteq [x]$ ισχύει

$$w(F([y])) \leq \lambda_{F,[x]} \cdot w_\infty([y]).$$

Η συνάρτηση F είναι Lipschitz εάν υπάρχει σταθερά Lipschitz της F στο $[x]$ για κάθε $[x] \in \mathbb{IR}^n$.

1.7 Συναρτήσεις εγκλεισμού

Ένας από τους βασικότερους λόγους που μελετάμε την διαστηματική αριθμητική είναι επειδή αναζητούμε μια απλή μέθοδο για τον εγκλεισμό του πεδίου τιμών μιας πραγματικής συνάρτησης. Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε με διαστηματικές συναρτήσεις, οι οποίες μας παρέχουν φράγματα για το πεδίο τιμών. Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και $[x] \in \mathbb{IR}^n$, τότε το πεδίο τιμών (range) της f θα συμβολίζεται με

$$f([x]) = \{f(x) \mid x \in [x]\}.$$

Θεώρημα 1.7.1 Αν η συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχής, τότε $f([x]) \in \mathbb{IR}$ για κάθε $[x] \in \mathbb{IR}^n$.

Ορισμός 1.7.1 Μια διαστηματική συνάρτηση $F : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ ονομάζεται συνάρτηση εγκλεισμού (inclusion function) ή διαστηματική επέκταση (interval extension) της πραγματικής συνάρτησης $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, αν ισχύουν

$$i) \quad f(x) = F(x) \text{ για κάθε } x \in \mathbb{R}^n \text{ και}$$

$$ii) \quad f([x]) \subseteq F([x]) \text{ για κάθε } [x] \in \mathbb{IR}^n.$$

Ομοίως ορίζονται και οι συναρτήσεις εγκλεισμού για μια διανυσματική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ενώ η ιδιότητα της μονότονης εγκλεισιμότητας (1.6.1) θα πρέπει να ισχύει

ανά συνιστώσα. Οι συναρτήσεις εγκλεισμού υπολογίζονται με χρήση διαστηματικής αριθμητικής διαστημάτων για σχεδόν όλες τις συναρτήσεις που ορίζονται από έναν πεπερασμένο αλγόριθμο. Αν F είναι μια διαστηματική επέκταση της πραγματικής συνάρτησης f τότε το διάστημα $F([x])$ μας παρέχει φράγματα για το πεδίο τιμών της f . Στην πράξη αντί του Ορισμού 1.7.1 χρησιμοποιούμε το ακόλουθο θεώρημα για να χαρακτηρίσουμε μια διαστηματική συνάρτηση F ως συνάρτηση εγκλεισμού της f .

Θεώρημα 1.7.2 *Αν η διαστηματική συνάρτηση $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ικανοποιεί τις παρακάτω ιδιότητες*

- i) $f(x) = F(x)$ για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$ και
- ii) $\forall [x] \subseteq [y] \in \mathbb{R}^n \Rightarrow F([x]) \subseteq F([y])$,

τότε η F είναι συνάρτηση εγκλεισμού της f .

Απόδειξη. Έστω ότι η F είναι μονότονα εγκλεισμένη και επιπλέον $f(x) = F(x)$ για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$. Αρκεί να δείξουμε ότι $f([x]) \subseteq F([x])$ για κάθε $[x]$. Έστω $[x] \in \mathbb{R}^n$ και $y \in f([x])$. Τότε υπάρχει $x \in [x]$ τέτοιο ώστε $y = f(x) = F(x)$ και εφόσον η F είναι μονότονα εγκλεισμένη συνεπάγεται ότι $y \in F([x])$. Άρα, $f([x]) \subseteq F([x])$. ■

1.7.1 Διαστηματική φυσική επέκταση

Ο πιο απλός τρόπος για να κατασκευάσει κανείς μια συνάρτηση εγκλεισμού F είναι να αντικαταστήσει στον τύπο της πραγματικής συνάρτησης $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ τις μεταβλητές x_i με τα αντίστοιχα διαστήματα $[x]_i$. Η συνάρτηση εγκλεισμού F που προκύπτει με αυτό τον τρόπο καλείται *διαστηματική φυσική επέκταση* (natural interval extension) της f . Η διαστηματική συνάρτηση F είναι πράγματι μια συνάρτηση εγκλεισμού αφού η F είναι μονότονα εγκλεισμένη, κάτι που προκύπτει από την μονότονη έγκλειση της διαστηματικής αριθμητικής (βλέπε Θεώρημα 1.3.1). Ας δούμε ένα παράδειγμα, έστω

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1 + x_2,$$

τότε η διαστηματική συνάρτηση

$$F([x]_1, [x]_2) = [x]_1^2 - [x]_1 + [x]_2$$

είναι η φυσική επέκταση της f . Αν τώρα, $[x] = ([1, 2], [3, 4])^T$ τότε έχουμε

$$\begin{aligned} f([x]) &= \{f(x_1, x_2) : x_1 \in [1, 2], x_2 \in [3, 4]\} = [3, 6] \\ F([x]) &= [x]_1^2 - [x]_1 + [x]_2 = [1, 2]^2 - [1, 2] + [3, 4] = [2, 7] \supseteq f([x]). \end{aligned}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι για κάθε πραγματική συνάρτηση μπορούμε να παράγουμε άπειρες φυσικές διαστηματικές επεκτάσεις και συνήθως κάθε μια από αυτές επιστρέφει διαφορετικά διαστήματα εγκλεισμού για το πεδίο τιμών. Ας θεωρήσουμε πάλι την συνάρτηση $f_1(x_1, x_2) = x_1^2 - x_1 + x_2$ η οποία είναι ισοδύναμη με την $f_2(x_1, x_2) = x_1 \cdot (x_1 - 1) + x_2$. Αν τώρα θεωρήσουμε το διαστηματικό διάνυσμα $[x] = ([-1, 2], [0, 0])^T$ βλέπουμε ότι οι

αντίστοιχες φυσικές επεκτάσεις F_1 και F_2 των f_1 και f_2 επιστρέφουν διαφορετικά αποτελέσματα:

$$\begin{aligned} F_1([x]) &= [x]_1^2 - [x]_1 + [x]_2 = [-1, 2]^2 - [-1, 2] + [0, 0] = [-2, 5], \\ F_2([x]) &= [x]_1 \cdot ([x]_1 - 1) + [x]_2 = [-1, 2] \cdot ([-1, 2] - 1) + [0, 0] = [-4, 2]. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε φυσική επέκταση μιας συνάρτησης f μπορούμε να υπολογίσουμε αλάνθαστα φράγματα για το πεδίο τιμών. Ωστόσο, τα φράγματα που παράγονται, ειδικά όταν το χωρίο $[x]$ είναι αρκετά μεγάλο, υπερεκτιμούν σε μεγάλο βαθμό το πραγματικό πεδίο τιμών. Έτσι, ένα από τα βασικότερα προβλήματα της διαστηματικής ανάλυσης είναι η εύρεση αυστηρών φραγμάτων (sharp bounds) για το $f([x])$. Σε δύο ειδικές περιπτώσεις το πεδίο τιμών $f([x])$ μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς.

1η Περίπτωση. Η πρώτη περίπτωση αφορά μονότονες συναρτήσεις μιας μεταβλητής, σ' αυτή την περίπτωση αρκεί να υπολογίσουμε την συνάρτηση στα δύο άκρα του διαστήματος. Έτσι, για αύξουσες συναρτήσεις $\varphi(x)$, $x \in \mathbb{R}$, έχουμε

$$\varphi([x]) = [\varphi(\underline{x}), \varphi(\overline{x})] \quad (1.7.1)$$

ενώ για φθίνουσες συναρτήσεις

$$\varphi([x]) = [\varphi(\overline{x}), \varphi(\underline{x})]. \quad (1.7.2)$$

Για παράδειγμα,

$$\begin{aligned} \text{abs}([x]) &= [\langle [x] \rangle, |[x]|], \\ \varphi([x]) &= [\varphi(\underline{x}), \varphi(\overline{x})], & \varphi \in \{\text{atan}, \text{asinh}, \ln, \sinh\}, \\ \varphi([x]) &= [\varphi(\overline{x}), \varphi(\underline{x})], & \varphi \in \{\text{acot}, \text{acoth}\}, \\ [x]^2 &= \text{sqr}([x]) = [\langle [x] \rangle^2, |[x]|^2], \\ \sqrt{[x]} &= \text{sqrt}([x]) = [\sqrt{\underline{x}}, \sqrt{\overline{x}}], & \text{αν } 0 \leq \underline{x} \\ \log([x]) &= [\log(\underline{x}), \log(\overline{x})], & \text{αν } 0 < \underline{x} \\ e^{[x]} &= \text{exp}([x]) = [e^{\underline{x}}, e^{\overline{x}}]. \end{aligned}$$

Επίσης, είναι δυνατόν να κατασκευάσουμε διαστηματικές επεκτάσεις για απλές μη-μονότονες συναρτήσεις όπου γνωρίζουμε τα ακρότατα. Έτσι, αν στο διάστημα $[x]$ η συνάρτηση $\varphi(x)$ παρουσιάζει ελάχιστο στο σημείο $x_0 \in [x]$, διχοτομούμε το διάστημα στο σημείο x_0 έτσι ώστε στα δύο υποδιαστήματα $[x]_1 = [\underline{x}, x_0]$ και $[x]_2 = [x_0, \overline{x}]$ η συνάρτηση να είναι μονότονη. Στη συνέχεια εφαρμόζουμε την (1.7.2) στο διάστημα $[x]_1$ και την (1.7.1) στο διάστημα $[x]_2$. Άρα, το πεδίο τιμών της φ στο διάστημα $[x]$ θα δίνεται $\varphi([x]) = \varphi([x]_1) \cup \varphi([x]_2)$. Για παράδειγμα, ας δούμε πως ορίζεται η συνάρτηση της δύναμης

$$[x]^n = \text{pow}([x], n) = \begin{cases} [\underline{x}^n, \overline{x}^n] & : \text{αν } n \in \mathbb{Z}^+ \text{ περιττός,} \\ [\text{mig}([x])^n, \text{mag}([x])^n] & : \text{αν } n \in \mathbb{Z}^+ \text{ άρτιος,} \\ [1, 1] & : \text{αν } n = 0, \\ [1/\overline{x}, 1/\underline{x}]^{-n} & : \text{αν } n \in \mathbb{Z}^- \text{ και } 0 \notin [x]. \end{cases}$$

Εδώ θα πρέπει να σημειώσουμε ότι ο ορισμός της n -οστής δύναμης ξεπερνά το πρόβλημα της εξάρτησης² που εμφανίζεται κατά τον πολλαπλασιασμό $[x] \times [x] \times \cdots \times [x]$ (n παράγοντες).

²Βλέπε ενότητα 1.3.2

Για παράδειγμα, για $n = 2$ και $[x] = [-2, 3]$ έχουμε ότι $[x]^2 = \{x^2 : x \in [x]\} = [0, 9]$, ενώ $[x] \times [x] = \{x \cdot y : x \in [x], y \in [x]\} = [-6, 9]$.

Ομοίως, μπορούμε να υπολογίσουμε συναρτήσεις εγκλεισμού για τριγωνομετρικές συναρτήσεις. Για παράδειγμα, αν ορίσουμε ως $S^+ = \{2k\pi + \pi/2 : k \in \mathbb{Z}\}$ και $S^- = \{2k\pi - \pi/2 : k \in \mathbb{Z}\}$ έχουμε ότι

$$\sin([x]) = \begin{cases} [-1, 1] & : \text{αν } [x] \cap S^- \neq [\emptyset] \text{ και } [x] \cap S^+ \neq [\emptyset], \\ [-1, \sigma_{\max}] & : \text{αν } [x] \cap S^- \neq [\emptyset] \text{ και } [x] \cap S^+ = [\emptyset], \\ [\sigma_{\min}, 1] & : \text{αν } [x] \cap S^- = [\emptyset] \text{ και } [x] \cap S^+ \neq [\emptyset], \\ [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}] & : \text{αν } [x] \cap S^- = [\emptyset] \text{ και } [x] \cap S^+ = [\emptyset], \end{cases}$$

όπου $\sigma_{\min} = \min\{\sin \underline{x}, \sin \bar{x}\}$ και $\sigma_{\max} = \max\{\sin \underline{x}, \sin \bar{x}\}$. Επομένως ο υπολογισμός του $\sin([x])$ ανάγεται στο να προσδιορίσουμε πότε τα σύνολα S^+ και S^- τέμνουν το συμπαγή σύνολο $[x]$, το οποίο δεν είναι δύσκολο. Προφανώς, αν $\text{rad}([x]) \geq \pi$, τότε και τα δύο σύνολα έχουν μη κενή τομή με το $[x]$. Με όμοιο τρόπο, χρησιμοποιώντας γνωστές τριγωνομετρικές ταυτότητες, όπως $\cos x = \sin(x + \frac{\pi}{2})$, μπορούμε να κατασκευάσουμε διαστηματικές επεκτάσεις για όλες τις τριγωνομετρικές συναρτήσεις.

2η Περίπτωση. Η δεύτερη περίπτωση όπου μπορούμε πολύ εύκολα να υπολογίσουμε το πεδίο τιμών αφορά συναρτήσεις πολλών μεταβλητών οι οποίες πληρούν τις προϋποθέσεις του κάτωθι θεωρήματος.

Θεώρημα 1.7.3 ([Μοο66]) Έστω ότι η συνεχής συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ δίνεται μέσω μιας έκφρασης $f(x)$ όπου κάθε μεταβλητή x_i , $i = 1, \dots, n$, εμφανίζεται το πολύ μια φορά στην πρώτη δύναμη. Επιπλέον, αν $F : \mathbb{IR}^n \rightarrow \mathbb{IR}$ είναι η αντίστοιχη διαστηματική φυσική επέκταση της f , τότε

$$f([x]) = F([x]) \text{ για κάθε } [x] \subseteq \mathbb{IR}^n.$$

Παράδειγμα 1.7.1 Θεωρούμε την συνάρτηση $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ με τύπο

$$f(x) = \frac{x_1 x_2 x_3}{x_2 - x_3}$$

Με την πρώτη ματιά, το Θεώρημα 1.7.3 δεν μπορεί να εφαρμοστεί εφόσον οι μεταβλητές x_2 και x_3 εμφανίζονται δύο φορές στον τύπο της συνάρτησης. Ωστόσο, στο συγκεκριμένο παράδειγμα, μπορούμε να τροποποιήσουμε τον τύπο της συνάρτησης (διαιρώντας αριθμητή και παρονομαστή με $x_2 x_3$) ώστε να πάρουμε την ισοδύναμη έκφραση

$$f(x) = \frac{x_1}{\frac{1}{x_3} - \frac{1}{x_2}}.$$

Εάν επιπροσθέτως τα διαστήματα $[x]_2$ και $[x]_3$ είναι τέτοια ώστε το διάστημα $1/[x]_3 - 1/[x]_2$ να μην περιέχει το μηδέν, τότε το πεδίο τιμών τιμών μπορεί να υπολογιστεί απευθείας από την φυσική επέκταση, δηλαδή,

$$f([x]) = F([x]) = \frac{[x]_1}{\frac{1}{[x]_3} - \frac{1}{[x]_2}}.$$

Δυστυχώς, είναι ελάχιστες οι εκφράσεις $f(x)$ τις οποίες μπορούμε να τις αναδιατάξουμε έτσι ώστε η υπόθεση του Θεωρήματος 1.7.3 να ισχύει. Επομένως, στην γενική περίπτωση η φυσική επέκταση δεν μας παρέχει αυστηρά φράγματα για το πεδίο τιμών.

Το πρόβλημα του υπολογισμού του πεδίου τιμών για μια αυθαίρετη συνάρτηση f σε ένα χωρίο $[x] \in \mathbb{IR}^n$ είναι ισοδύναμο με την βελτιστοποίηση της συνάρτησης (εύρεση ολικού ελαχίστου και μεγίστου) εντός του $[x]$. Και στις δύο περιπτώσεις είναι πολύ χρήσιμο να γνωρίζουμε ασυμπτωτικές ιδιότητες σύγκλισης των παραγόμενων φραγμάτων για το πεδίο τιμών της f καθώς $\|w([x])\| \rightarrow 0$.

Ορισμός 1.7.2 (Τάξη σύγκλισης) Έστω F μια συνάρτηση εγκλεισμού της $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Αν υπάρχει σταθερά K , ανεξάρτητη από το διαστηματικό διάνυσμα $[x] \in \mathbb{IR}^n$, έτσι ώστε

$$q(f([x]), F([x])) \leq K \cdot w_\infty([x])^\alpha$$

για όλα τα $[x]$ με επαρκώς μικρό $w([x])$ και σταθερό $\alpha > 0$, τότε θα λέμε ότι η F είναι συνάρτηση εγκλεισμού της f τάξης α . Όταν $\alpha = 1$ ή $\alpha = 2$ η συνάρτηση εγκλεισμού θα καλείται πρώτης ή δεύτερης τάξης, αντίστοιχα.

Από τον παραπάνω ορισμό είναι φανερό ότι οποιαδήποτε Lipschitz³ διαστηματική επέκταση F της f συγκλίνει γραμμικά.

Θεώρημα 1.7.4 ([Moo66]) Έστω $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ συνεχής και έστω $[x] \subseteq [x]^0 \subseteq \mathcal{D}$. Τότε

$$\begin{aligned} q(f([x]), F([x])) &\leq \gamma \cdot w_\infty([x]), \quad \gamma \geq 0, \\ w(F([x])) &\leq \delta \cdot w_\infty([x]), \quad \delta \geq 0, \end{aligned}$$

όπου οι σταθερές γ και δ εξαρτώνται από το $[x]^0$ και όχι από το $[x]$.

Το θεώρημα 1.7.4 δηλώνει ότι αν υπάρχει η φυσική επέκταση F της f τότε η απόσταση Hausdorff μεταξύ του πεδίου τιμών $f([x])$ και $F([x])$ τείνει γραμμικά στο μηδέν, δηλαδή, η φυσική επέκταση είναι τάξεως $\alpha = 1$. Επίσης, το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού $F([x])$ τείνει γραμμικά στο μηδέν καθώς η διάμετρος του $[x]$ τείνει στο μηδέν.

Επομένως, τίθεται το ερώτημα αν μπορούμε να κατασκευάσουμε συναρτήσεις εγκλεισμού με τάξη σύγκλισης $\alpha > 1$. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε συνοπτικά συναρτήσεις εγκλεισμού τετραγωνικής σύγκλισης.

1.7.2 Κεντροθετημένες μορφές

Οι κεντροθετημένες μορφές (centered forms) είναι συναρτήσεις εγκλεισμού οι οποίες εισήχθηκαν από τον Ramon Moore (1966) για ρητές συναρτήσεις. Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και $[x] \in \mathbb{IR}^n$, για να παράγουμε την κεντροθετημένη μορφή $F_c([x])$ της f , πρέπει να γράψουμε την συνάρτηση $f(x_1, \dots, x_n)$ στην μορφή

$$f(x_1, \dots, x_n) = f(c_1, \dots, c_n) + g(y_1, \dots, y_n)$$

όπου $c_i = m([x]_i)$ ενώ $y_i = x_i - c_i$, $i = 1, \dots, n$. Έτσι, η συνάρτηση g ορίζεται ως

$$g(y_1, \dots, y_n) = f(y_1 + c_1, \dots, y_n + c_n) - f(c_1, \dots, c_n)$$

³Βλέπε Ορισμό 1.6.3, σελίδα 15.

η οποία εξαρτάται εκτός από τα y_i και από τα c_i . Επομένως, θεωρώντας την φυσική επέκταση της συνάρτησης $g : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ ως $G : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ η κεντροθετημένη μορφή ορίζεται από την ακόλουθη έκφραση

$$F_c([x]) = f(c) + G(c, [x] - c)$$

όπου $[x] \in \mathbb{R}^n$ και $c \in \mathbb{R}^n$.

Παράδειγμα 1.7.2 Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε το $F_c([x])$ της $f(x_1, x_2) = \frac{x_1 + x_2}{x_1 - x_2}$ στο χωρίο $[x] = ([1, 2], [5, 10])^T$. Γράφουμε το δοθέντα τύπο στην μορφή

$$f(x_1, x_2) = \frac{x_1 + x_2}{x_1 - x_2} = \frac{c_1 + c_2}{c_1 - c_2} + g(x_1 - c_1, x_2 - c_2)$$

Θέτουμε $y_1 = x_1 - c_1$, $y_2 = x_2 - c_2$ και λύνουμε ως προς $g(y_1, y_2)$, επομένως έχουμε:

$$g(y_1, y_2) = \frac{(y_1 + c_1) + (y_2 + c_2)}{(y_1 + c_1) - (y_2 + c_2)} - \frac{c_1 + c_2}{c_1 - c_2} = \frac{2(c_1 y_2 - c_2 y_1)}{(c_1 - c_2)^2 + (c_1 - c_2)(y_1 - y_2)}.$$

Άρα, η κεντροθετημένη μορφή είναι

$$F_c([x]) = f(m([x])) + G(m([x]), [x] - m([x]))$$

όπου $G : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ με τύπο $G(c, Y) = \frac{2(c_1 Y_2 - c_2 Y_1)}{(c_1 - c_2)^2 + (c_1 - c_2)(Y_1 - Y_2)}$. Αντικαθιστώντας, έχουμε $F_c([x]) = [-\frac{7}{3}, -\frac{2}{3}]$. Ενώ η φυσική επέκταση της f δίνει $F([x]) = [-4, -\frac{2}{3}]$. Δηλαδή, $F_c([x]) \subseteq F([x])$.

Το βασικό πλεονέκτημα της κεντροθετημένης μορφής είναι η τετραγωνική σύγκλιση ($\alpha = 2$) κάτι που είχε αναφερθεί αρχικά από τον Moore ως εικασία και στην συνέχεια αποδείχτηκε από τον Hansen [Han69] για ρητές συναρτήσεις πολλών μεταβλητών. Επιπλέον, δεν προϋποθέτει να είναι παραγωγίσιμη η συνάρτηση f .

Ένα μειονέκτημα της κεντροθετημένης μορφής είναι ότι δεν είναι πάντα μονότονα εγκλεισμένη, μια ιδιότητα η οποία είναι απαραίτητη για την ολική βελτιστοποίηση συναρτήσεων. Για παράδειγμα, θεωρούμε την συνάρτηση $f(x) = x(1 - x)$, τότε μπορούμε να αναπαραστήσουμε την f στην κεντροθετημένη μορφή $f(x) = f(c) + (1 - 2c)(x - c) - (x - c)^2$. Οι δύο τύποι είναι ισοδύναμοι για οποιαδήποτε τιμή του αριθμού $c \in \mathbb{R}$. Έστω $[y] = [0, 1]$ και $c = m([y]) = 0.5$, τότε έχουμε $F_c([y]) = [0, 0.25]$. Αν τώρα θεωρήσουμε το $[x] = [0, 0.9] \subseteq [y]$ και $c = m([x]) = 0.45$, τότε $F_c([x]) = [0, 0.2925]$. Άρα, για $[x] \subseteq [y] \Rightarrow F_c([x]) \not\subseteq F_c([y])$.

Ένα άλλο μειονέκτημα της κεντροθετημένης μορφής είναι ότι απαιτείται η παραγωγή της συνάρτησης $g : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ αναλυτικά. Η παραγωγή της g είναι μια διαδικασία η οποία δεν μπορεί να θεωρηθεί τετριμμένη, ακόμα και με την βοήθεια πακέτων λογισμικού (π.χ. Maple, Mathematica). Γι' αυτό στην πράξη προτιμούμε άλλες συναρτήσεις εγκλεισμού όπως την μορφή της μέσης τιμής (mean value form) και μορφή Taylor (Taylor form) οι οποίες μπορούν να υπολογιστούν αυτόματα.

1.7.3 Μορφές μέσης τιμής & Taylor

Η μορφή της μέσης τιμής θεωρείται η γενίκευση της κεντροθετημένης μορφής [AL85] γι' αυτό το λόγο πολλοί συγγραφείς αναφέρονται στην μορφή της μέσης τιμής χρησιμοποιώντας το όρο κεντροθετημένη (centered form). Η μορφή μέσης τιμής [Μοο66] μπορεί να παραχθεί πολύ εύκολα από το θεώρημα μέσης τιμής. Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη στο πεδίο ορισμού της $\mathcal{D}$. Επιπλέον, $[x] \in \mathbb{R}^n$ και $c = m([x]) \in \mathbb{R}^n$ το κέντρο του διαστηματικού διανύσματος $[x] \subseteq \mathcal{D}$. Τότε, για κάθε $x \in [x]$ από το θεώρημα μέσης τιμής έχουμε

$$f(x) = f(c) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(\xi)(x_i - c_i), \quad \xi \in [x].$$

Εάν F'_i συμβολίζει την φυσική επέκταση της μεριχής παραγώγου $f'_i = \partial f / \partial x_i$ στο $[x]$, τότε

$$f(x) \in f(c) + \sum_{i=1}^n F'_i([x])([x]_i - c_i) \quad (1.7.3)$$

για κάθε $x \in [x]$. Έτσι, το δεξί μέλος της (1.7.3) ορίζει μια συνάρτηση εγκλεισμού για την f , η οποία καλείται *μορφή μέσης τιμής* και σε διανυσματική μορφή γράφεται ως

$$F_{MVF}([x]) = f(c) + F'([x]) \cdot ([x] - c) \quad (1.7.4)$$

όπου $F'([x]) = (F'_1([x]), \dots, F'_n([x]))^T$ και $c = m([x])$.

Θεώρημα 1.7.5 ([CM80]) *Αν οι διαστηματικές συναρτήσεις $F'_i([x])$, $i = 1, \dots, n$, είναι μονότονα εγκλεισμένες και $c = m([x])$ τότε η μορφή της μέσης τιμής $F_{MVF}([x])$ είναι μονότονα εγκλεισμένη.*

Παρατηρούμε ότι η μορφή της μέσης τιμής $F_{MVF}([x])$ δεν εξαρτάται από την έκφραση της f αφού η f υπολογίζεται μόνο στο εκφυλισμένο διαστηματικό διάνυσμα c . Ωστόσο, εξαρτάται από την συνάρτηση εγκλεισμού F' της f' . Επομένως, διαφορετικές εκφράσεις της f' οδηγούν σε διαφορετικά διαστήματα εγκλεισμού για την F_{MVF} . Το διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου $F'([x])$ μπορεί να υπολογιστεί αυτόματα (χωρίς να γνωρίζουμε την αναλυτική έκφραση) με χρήση *αυτόματης διαφορίσης* [Ral81] σε συνδυασμό με διαστηματική αριθμητική. Οι Caprani και Madsen [CM80] καθώς και ο Rall [Ral83a] έχουν δείξει ότι η μορφή της μέσης τιμής είναι δεύτερης τάξης, δηλαδή,

$$w(F_{MVF}([x])) - w(f([x])) = \mathcal{O}(w([x])^2)$$

όταν η F' είναι Lipschitz, δηλαδή ισχύει $q(f'([z]), F'([z])) = \mathcal{O}(w([z]))$, για κάθε $[z] \subseteq [x]$. Σε σύγκριση με την φυσική επέκταση $F([x])$, η μορφή της μέσης τιμής παρέχει καλύτερα φράγματα όταν το διάστημα $[x]$ είναι σχετικά μικρό. Αντιθέτως, $F_{MVF}([x])$ μπορεί να υπερεκτιμή το πεδίο τιμών της f όταν το πλάτος του $[x]$ είναι πολύ μεγάλο. Γι' αυτό το λόγο, στην πράξη χρησιμοποιούμε την τομή $F_{MVF}([x]) \cap F([x])$ προκειμένου να πάρουμε το καλύτερο δυνατό διάστημα εγκλεισμού για το πεδίο τιμών $f([x])$.

Έστω τώρα ότι η συνάρτηση f είναι δύο φορές παραγωγίσιμη και $F'' : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ μια συνάρτηση εγκλεισμού του Εσσιανού πίνακα, τότε η μορφή *Taylor* (Taylor form) ορίζεται ως

$$E_{TF}([x]) = f(c) + ([x] - c)^T f'(c) + \frac{1}{2} ([x] - c)^T F''([x]) ([x] - c) \quad (1.7.5)$$

Το βασικό μειονέκτημα της μορφής Taylor είναι το αυξημένο υπολογιστικό κόστος για τον υπολογισμό της συνάρτησης εγκλεισμού της Εσσιανής, οπότε σε προβλήματα μεγάλων διαστάσεων η χρήση της τείνει να είναι απαγορευτική. Αξίζει να σημειωθεί ότι παρότι το γεγονός ότι η μορφή Taylor χρησιμοποιεί δεύτερης τάξης παράγωγο, η τάξη σύγκλισης παραμένει τετραγωνική [Ral83a, RR84].

Φυσικά, κάποιος μπορεί να αναρωτηθεί αν είναι δυνατόν να κατασκευάσουμε συναρτήσεις εγκλεισμού ανώτερης τάξης ($\alpha > 2$). Το ερώτημα αυτό τέθηκε από τον Alefeld [Ale90, σελ. 63] στις αρχές του '90 και παρέμεινε ανοικτό θέμα μέχρι το 2002 όπου ο Hertling [Her02] έδωσε μια αρνητική απάντηση. Συγκεκριμένα, ο Hertling απέδειξε ότι αν υπάρχουν σημεία $z \in [x]$ τέτοια ώστε $f'(z) = 0$ και $f''(z) \neq 0$ τότε δεν μπορείς να προσεγγίσεις το πεδίο τιμών μιας συνάρτησης με σφάλμα μικρότερο της τετραγωνικής τάξης. Το αποτέλεσμα αυτό έκλεισε ένα μεγάλο κεφάλαιο στην διαστηματική ανάλυση και αποτέλεσε το κίνητρο να στραφούμε στην παραγωγή βέλτιστων μορφών μέσης τιμής (βλέπε Κεφάλαιο 3).

Κεφάλαιο 2

Ολική βελτιστοποίηση με διαστηματικές μεθόδους

2.1 Εισαγωγή

Τα προβλήματα που εμφανίζονται στη φύση μπορεί να είναι δύσκολα προβλήματα βελτιστοποίησης ή να μοντελοποιούνται από συνεχείς συναρτήσεις που εμφανίζουν ένα μεγάλο πλήθος τοπικά βέλτιστων λύσεων κάνοντας κατά αυτόν τον τρόπο δύσκολη, αν όχι αδύνατη, την επίλυσή τους με χρήση κλασικών αιτιοκρατικών μεθόδων.

Υπάρχουν πολλά παραδείγματα στην βιβλιογραφία όπου οι κλασικές αιτιοκρατικές μέθοδοι, όπως η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου, των συζυγών κλίσεων, των quasi-Newton, κλπ., αποτυγχάνουν να εντοπίσουν το ολικό ελάχιστο μιας αντικειμενικής συνάρτησης. Για το λόγο αυτό, τα τελευταία χρόνια η έρευνα κατευθύνθηκε προς τους στοχαστικούς ευρετικούς αλγορίθμους (πχ Simulated Annealing) και ειδικότερα σε αυτούς που εμπνέονται από φυσικά ή βιολογικά φαινόμενα (πχ Genetic Algorithms). Εν γένει, οι αλγόριθμοι αυτοί υπερέχουν έναντι των κλασικών αιτιοκρατικών μεθόδων επειδή έχουν την ιδιότητα να μην εγκλωβίζονται σε τοπικά βέλτιστες λύσεις και συνήθως μπορούν να εντοπίσουν μια από τις περιοχές της ολικά βέλτιστης λύσης μετά από ένα μεγάλο αριθμό αποτιμήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης.

Ας θεωρήσουμε την συνάρτηση $f(x) = 3x^2 - 0.03 \exp(-(400(-x - 0.0675))^2) + 0.017$ στο διάστημα $[x] = [-0.2, 0.15]$, μια γραφική απεικόνιση της οποίας δίνεται στο Σχήμα 2.1. Αν και το διάστημα αναζήτησης για το ολικό ελάχιστο, στο συγκεκριμένο παράδειγμα, είναι πολύ μικρό (πλάτους 0.35) οι κλασικές μέθοδοι αποτυγχάνουν να προσεγγίσουν την βέλτιστη λύση του προβλήματος. Το ίδιο φαινόμενο παρατηρείται και στους στοχαστικούς αλγορίθμους όπου παρατηρούμε πρόωρη σύγκλιση στο προφανή τοπικό ελάχιστο της συγκεκριμένης αντικειμενικής συνάρτησης. Επιπλέον, δεν υφίσταται μηχανισμός για να επαληθευτεί ότι η ευρεθείσα τιμή αντιστοιχεί στη βέλτιστη λύση.

Ωστόσο, σε πολλά προβλήματα μας ενδιαφέρει άμεσα να βρούμε με εγγύηση την τιμή του ολικού ελαχίστου καθώς και όλους τους ολικούς ελαχιστοποιητές. Μέχρι σήμερα δεν υπάρχει στην διεθνή βιβλιογραφία κάποιο αποτέλεσμα (θεώρημα ή πρόταση) το οποίο

Σχήμα 2.1. Ένα παράδειγμα όπου οι κλασικές μέθοδοι μπορούν να εντοπίσουν μόνο ένα σημείο τοπικού ελαχίστου.

να παρέχει εγγύηση ότι η χρήση τοπικών, στοχαστικών, καθώς και υβριδικά σχήματα αυτών μπορούν να εξασφαλίσουν μια εγγυημένη λύση στο προαναφερόμενο πρόβλημα. Γενικά, υπάρχει ο ισχυρισμός ότι είναι αδύνατο να λυθεί ένα πρόβλημα ολικής βελτιστοποίησης, γιατί είναι αδύνατο να αποφανθούμε αν μια συνάρτηση παρουσιάζει ολικό ελάχιστο (ή ολικό μέγιστο) μεταξύ δύο σημείων (βλέπε Σχήμα 2.1), στην περίπτωση όπου ο δειγματικός χώρος αποτελείται από μεμονωμένες συναρτησιακές τιμές και δεν είναι διαθέσιμη ολική πληροφορία.

Η διαδικασία εύρεσης λύσεων στους στοχαστικούς ευρετικούς αλγορίθμους (καθώς και στα υβριδικά σχήματα αυτών) πραγματοποιείται πάντοτε μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας. Σε κάθε επανάληψη δημιουργούνται από τον αλγόριθμο μια ή περισσότερες λύσεις από τον αντίστοιχο αριθμό ατόμων (individuals) που ανήκουν στο χώρο των πιθανών λύσεων. Η καταλληλότητα των λύσεων αυτών εκτιμάται μέσω της συνάρτησης κόστους. Πολλές φορές οι αλγόριθμοι αυτοί κατά τη διαδικασία εύρεσης λύσεων προσαρμόζονται συνεχώς στο χώρο των λύσεων μεταβάλλοντας τις παραμέτρους τους. Η παραπάνω γενική διαδικασία συνεχίζεται έως ότου ολοκληρωθεί ένας συγκεκριμένος αριθμός επαναλήψεων (γενιές) ή ικανοποιηθεί ένα κριτήριο σύγκλισης (επίτευξη προκαθορισμένης τιμής). Τα τρία κυριότερα μειονεκτήματα των στοχαστικών αλγορίθμων είναι τα εξής: α) πολλές φορές δυσκολεύονται να προσεγγίσουν την ακριβή τιμή της βέλτιστης λύσης του προβλήματος αν και συνήθως εντοπίζουν γρήγορα την περιοχή στην οποία αυτή βρίσκεται β) απαιτούν μεγάλο αριθμό εκτιμήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης – και επομένως έχουν υψηλό υπολογιστικό κόστος – προκειμένου να δώσουν ένα καλό αποτέλεσμα και γ) συνήθως έχουν ένα μεγάλο αριθμό παραμέτρων, ο οποίος κάνει δύσκολη τη βέλτιστη ρύθμιση του αλγορίθμου.

Την τελευταία δεκαετία πολλοί ερευνητές έχουν στραφεί στην αναζήτηση αξιόπιστων μεθόδων με αυτόματη επαλήθευση αποτελεσμάτων. Στις μέρες μας, έγκυρα αποτελέσματα

μπορούν να επιτευχθούν μόνο με χρήση μεθόδων διαστηματικής ανάλυσης. Αυτό μπορεί να γίνει αντικαθιστώντας την συμβατική αριθμητική, που χρησιμοποιούν οι υπολογιστές σήμερα, με την διαστηματική αριθμητική. Άλλωστε, όταν η διαστηματική αριθμητική προτάθηκε από τον Ramon Moore [Moore6] αποσκοπούσε κυρίως στο να δώσει λύση στο πρόβλημα των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης που εμφανίζονται σε πάσης φύσεως αριθμητικούς υπολογισμούς. Σήμερα όμως, η διαστηματική αριθμητική αποτελεί το βασικό εργαλείο όχι μόνο για την υλοποίηση αξιόπιστων αριθμητικών μεθόδων, αλλά και για την ανάπτυξη ολικών μεθόδων. Για παράδειγμα, το πρόβλημα της εύρεσης όλων των ριζών μιας μη γραμμικής εξίσωσης που κάποτε ήταν ανέφικτο σήμερα θεωρείται τετριμμένο για την διαστηματική ανάλυση ενώ παραμένει υπό μελέτη για μεθόδους που χρησιμοποιούν την συνήθη πραγματική αριθμητική.

Όσον αφορά το πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης, οι διαστηματικές μέθοδοι παρέχουν εγγυημένα φράγματα τόσο για την τιμή του ολικού ελαχίστου (ή μεγίστου) όσο και για όλους τους ολικούς ελαχιστοποιητές (ή μεγιστοποιητές). Αυτό είναι εφικτό διότι χρησιμοποιούν ολική πληροφορία για την αντικειμενική συνάρτηση σε ένα συμπαγές σύνολο και όχι σε μεμονωμένα σημεία όπως οι κλασικές μέθοδοι. Τα βασικά πλεονεκτήματα των διαστηματικών μεθόδων είναι: (α) εγγυημένα φράγματα για όλες τις λύσεις, (β) δεν υφίσταται το πρόβλημα των τοπικών βέλτιστων λύσεων που αντιμετωπίζουν οι κλασικές μέθοδοι, (γ) υπολογισμός όλων των στάσιμων σημείων μιας συνάρτησης, και απαρίθμηση αυτών, (δ) εντοπισμός περιοχών όπου η συνάρτηση είναι γνησίως μονότονη ή κυρτή και (ε) μπορούμε να επαληθεύσουμε υπολογιστικά την μοναδικότητα μιας τοπικά βέλτιστης λύσης (Brouwer's Fixed-Point Theorem).

Αξίζει να σημειωθεί ότι αν κάποιος έχει στην διάθεσή του μια μέθοδο ολικής βελτιστοποίησης τότε μπορεί να δώσει απάντηση στο πρόβλημα του υπολογισμού του πεδίου τιμών μιας συνάρτησης. Είναι προφανές ότι αυτό μπορεί να επιτευχθεί με τα ακόλουθα δυο βήματα: (α) εύρεση του ολικού ελαχίστου και (β) εύρεση του ολικού μεγίστου. Έτσι, το διάστημα που ορίζεται από την ελάχιστη και μέγιστη τιμή της συνάρτησης αποτελεί το πεδίο τιμών της.

2.2 Το πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης

Θεωρούμε το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης μιας συνεχούς και διαφορίσιμης συνάρτησης $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, στο κυρτό χωρίο $[x] \in \mathbb{IR}^n$ όπου, $[x] \subseteq \mathcal{D}$ και $\mathcal{D}$ ανοικτό σύνολο. Δηλαδή, αναζητούμε το ολικό ελάχιστο

$$f^* = \min_{x \in [x]} f(x) \quad (2.2.1)$$

καθώς και το σύνολο των σημείων ολικού ελαχίστου (ή ολικών ελαχιστοποιητών)

$$\mathcal{X}^* = \{x^* \in [x] : f(x^*) = f^*\}$$

Επειδή η συνάρτηση f είναι συνεχής στο χωρίο¹ $[x]$ η ύπαρξη τουλάχιστον ενός ολικού ελαχιστοποιητή είναι εγγυημένη. Το ολικό μέγιστο της συνάρτησης f είναι το ολικό ελάχιστο της συνάρτησης $-f$. Επομένως, το πρόβλημα της μεγιστοποίησης είναι ισοδύναμο με

¹Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιούμε εναλλακτικά τους όρους χωρίο ή διαστηματικό διάστημα

το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης. Στην συνέχεια με τον όρο βελτιστοποίηση θα εννοούμε την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης f .

2.3 Διαστηματικοί αλγόριθμοι διακλάδωσης και φραξίματος

Οι διαστηματικές μέθοδοι ολικής βελτιστοποίησης βασίζονται στην αρχή διακλάδωσης και φραξίματος (branch and bound principle), η οποία εισήχθηκε στις εργασίες [LD60] και [LSK63]. Σύμφωνα με την αρχή της διακλάδωσης και φραξίματος, η αρχική περιοχή αναζήτησης δεν ψάχνεται ομοιόμορφα για ολικά ελάχιστα αλλά μερικά τμήματά της. Επιπλέον, για κάθε υπο-περιοχή απαιτείται ένα κάτω φράγμα για την αντικειμενική συνάρτηση. Ο υπολογισμός των φραγμάτων γίνεται με χρήση κατάλληλων συναρτήσεων εγκλεισμού με την βοήθεια της διαστηματικής αριθμητικής. Η ανάπτυξη διαστηματικών μεθόδων για ολική βελτιστοποίηση ξεκίνησε το 1966 με έναν αλγόριθμο που προτάθηκε από τον Moore [Mo66] και αργότερα βελτιώθηκε από τον Skelboe [Ske74]. Ωστόσο, οι αλγόριθμοι αυτοί αποσκοπούσαν στην εύρεση της τιμής του ολικού ελαχίστου f^* . Διαστηματικές μέθοδοι, οι οποίες προσδιόριζαν εκτός από το f^* και το σύνολο $\mathcal{X}^*$ προτάθηκαν από τους Ichida και Fujii [IF79] και από τον Hansen [Han79, Han80]. Η περιγραφή των μεθόδων αυτών δίνονται στα βιβλία [RR88] και [Han92].

Οι περισσότερες διαστηματικές μέθοδοι μπορούν να θεωρηθούν ως ολικές μέθοδοι αναζήτησης οι οποίες επαναληπτικά εφαρμόζουν τα ακόλουθα βασικά βήματα:

- i) υποδιαίρεση της αρχικής περιοχής αναζήτησης σε μικρότερες υποπεριοχές
- ii) υπολογισμό φραγμάτων για την αντικειμενική συνάρτηση (και ενδεχομένως για τις παραγώγους της) και
- iii) απαλοιφή των υποπεριοχών, οι οποίες εγγυημένα δεν περιέχουν σημεία ολικού ελαχίστου.

Είναι σαφές ότι ένας διαστηματικός αλγόριθμος μπορεί να οριστεί αν προσδιορίσουμε την στρατηγική υποδιαίρεσης (διακλάδωση) στο βήμα (i), την συνάρτηση εγκλεισμού (φράξιμο) καθώς και τις διαδικασίες επιτάχυνσης² (accelerating devices) που θα χρησιμοποιηθούν στο βήμα (iii) για την ταχύτερη ανεύρεση μιας λύσης.

Στην συνέχεια θα περιγράψουμε αναλυτικά τον βασικό αλγόριθμο³ στον οποίο βασίζονται οι περισσότερες διαστηματικές μέθοδοι. Ο Αλγόριθμος 2.1 παίρνει ως είσοδο το αρχικό χωρίο αναζήτησης $[x]^0 \in \mathbb{IR}^n$ καθώς και μια συνάρτηση εγκλεισμού F της f και επιστρέφει εγγυημένα φράγματα για την τιμή του ολικού ελαχίστου f^* καθώς και για το σύνολο $\mathcal{X}^*$. Ο αλγόριθμος συντηρεί ένα ασφαλές άνω φράγμα $\tilde{f}$ για το ολικό ελάχιστο f^* καθώς και δύο λίστες (ή δέντρα), μια λίστα εργασίας L και μια λίστα αποτελεσμάτων L^* . Αφού αρχικοποιήσουμε το άνω φράγμα με $\sup F([x]^0)$, τοποθετούμε στη λίστα εργασίας L το ζεύγος $([x]^0, \inf F([x]^0))$ ενώ η λίστα αποτελεσμάτων L^* αρχικοποιείται με την κενή λίστα. Στην συνέχεια, όσο η λίστα εργασίας δεν είναι κενή, επιλέγουμε⁴ ένα ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ από την L και υποδιαιρούμε⁵ το χωρίο $[x]$ σε k υποχωρία $[x]^1, \dots, [x]^k$, $i = 1, \dots, k$. Για κάθε $[x]^i$ υπολογίζουμε το $F([x]^i)$. Αν τώρα ισχύει ότι $\inf F([x]^i) \leq \tilde{f}$,

²Θα αναφερόμαστε αναλυτικά στην ενότητα 2.6.

³Ο Αλγόριθμος 2.1 βασίζεται στην αρχή διακλάδωσης και φραξίματος.

⁴Θα περιγράψουμε στρατηγικές επιλογής ζεύγους στην ενότητα 2.4

⁵στρατηγικές υποδιαίρεσης χωρίου θα περιγραφούν στην ενότητα 2.5

Αλγόριθμος 2.1 Ο βασικός διαστηματικός αλγόριθμος

Είσοδος: το αρχικό χωρίο $[x]^0 \in \mathbb{IR}^n$, η συνάρτηση εγκλεισμού F ;

Έξοδος: ένα διάστημα εγκλεισμού $[f]^* \in \mathbb{IR}$ για το ολικό ελάχιστο, μια λίστα L^* η οποία περιέχει όλα τα σημεία ολικού ελαχίστου;

```
 $\tilde{f} := \sup F([x]^0);$  { /* αρχικοποίηση άνω φράγματος */ }  
Αρχικοποίησε την λίστα εργασίας  $L := \{ ([x]^0, \inf F([x]^0)) \}$   
Αρχικοποίησε την λίστα αποτελεσμάτων  $L^* := \emptyset$ ;  
while  $L \neq \emptyset$  do  
  επέλεξε  $([x], \inf F([x])) \in L$ ;  
  υποδιαίρεσε το χωρίο  $[x]$  στα χωρία  $[x]^1, \dots, [x]^k, k \geq 2$ ;  
  for  $i = 1$  to  $k$  do  
    if  $\inf F([x]^i) \leq \tilde{f}$  then  
       $\tilde{f} := \min\{\tilde{f}, \sup F([x]^i)\};$  { /* ενημέρωση του άνω φράγματος */ }  
      if  $w(F([x]^i)) \leq \varepsilon$  then  
        αποθήκευσε το ζεύγος  $([x]^i, \inf F([x]^i))$  στην λίστα  $L^*$ ;  
      else  
        αποθήκευσε το ζεύγος  $([x]^i, \inf F([x]^i))$  στην λίστα  $L$ ;  
      end if  
    end if  
  end for  
   $L := \text{cut-off}(L, \tilde{f});$   
end while  
 $L^* := \text{cut-off}(L^*, \tilde{f});$   
επέλεξε το ζεύγος  $([x], \inf F([x])) \in L^*$  με το μικρότερο  $\inf F([x])$ ;  
 $[f]^* := [\inf F([x]), \tilde{f}]$ ;  
Επέστρεψε  $[f]^*, L^*$ ;
```

τότε αποθηκεύουμε το ζεύγος $([x]^i, \inf F([x]^i))$ είτε στην λίστα αποτελεσμάτων L^* είτε στη λίστα εργασίας L , διαφορετικά μπορούμε να διαγράψουμε το $[x]^i$. Το κριτήριο για την εισαγωγή του ζεύγους $([x]^i, \inf F([x]^i))$ στην λίστα L^* είναι το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού $F([x]^i)$ να είναι μικρότερο από ε , όπου ε είναι η απαιτούμενη ακρίβεια. Εάν το $\sup F([x]^i)$ είναι μικρότερο από το $\tilde{f}$ τότε μπορούμε να ενημερώσουμε το άνω φράγμα $\tilde{f}$. Στην συνέχεια εξετάζουμε αν είναι δυνατόν να διαγραφούν κάποια στοιχεία $([x], \inf F([x]))$ της λίστας L για τα οποία ισχύει $\inf F([x]) > \tilde{f}$. Η περιγραφή του cut-off test δίνεται στον Αλγόριθμο 2.2. Όσο η λίστα L είναι μη κενή η διαδικασία επαναλαμβάνεται. Στο τέλος, πριν ο αλγόριθμος επιστρέψει την λίστα αποτελεσμάτων L^* εφαρμόζουμε το cut-off test με την πιο πρόσφατη τιμή του άνω φράγματος $\tilde{f}$.

2.4 Στρατηγικές επιλογής διαστήματος

Η επιλογή του επόμενου ζεύγους $([x], \inf F([x]))$ από την λίστα εργασίας L στον Αλγόριθμο 2.1 είναι μεξονος σημασίας για την αποδοτικότητά του. Στη βιβλιογραφία έχουν

Είσοδος: η λίστα L και ένα ασφαλές άνω φράγμα $\tilde{f}$;

Έξοδος: η λίστα L χωρίς τα στοιχεία $([x], \inf F([x]))$ για τα οποία ισχύει $\inf F([x]) > \tilde{f}$;

```
for  $i = 1$  to  $\#L$  do
  if  $\inf F([x]^i) > \tilde{f}$  then
    διέγραψε το ζεύγος  $([x]^i, \inf F([x]^i))$  από την λίστα  $L$ ;
  end if
end for
Επέστρεψε την λίστα  $L$ ;
```

προταθεί τρεις βασικές στρατηγικές για την ταξινόμηση των ζευγών στην λίστα εργασίας:

- Η *oldest-first* στρατηγική. Βασίζεται στην ιδέα της επιλογής του κουτιού που έχει παραμείνει στην λίστα εργασίας L για τον περισσότερο χρόνο. Σε αυτή την περίπτωση η λίστα εργασίας L μπορεί να υλοποιηθεί ως ουρά (queue).

- Η *best-first* στρατηγική. Επιλέγεται εκείνο το κουτί από την λίστα εργασίας που αντιστοιχεί στο μικρότερο κάτω φράγμα. Σε αυτή την περίπτωση η λίστα εργασίας υλοποιείται ως μια διατεταγμένη λίστα.

- Η *depth-first* στρατηγική. Επιλέγεται ένα από τα πιο πρόσφατα κουτιά που έχουν δημιουργηθεί από τον αλγόριθμο. Σε αυτή την περίπτωση η λίστα εργασίας υλοποιείται ως μία στοίβα (stack).

Η στρατηγική *best-first* έχει χρησιμοποιηθεί στις εργασίες [CGM93, HM92] ως *breadth-first* στρατηγική. Η *oldest-first* στρατηγική χρησιμοποιήθηκε στις εργασίες [Han79] και [Han80]. Διαστηματικοί αλγόριθμοι που κάνουν χρήση της στρατηγικής *best-first* έχουν προταθεί στις εργασίες [Han92], [IF79], [Moo66] και [Ske74]. Ενώ σε μια σειρά εργασιών του Jansson [Jan91], [Jan94a] και [Jan94b] μπορεί κανείς να βρει ένα συνδυασμό των *oldest-first* και *best-first* στρατηγικών. Επίσης, οι Ratschek και Rokne στην εκτενή ανασκόπηση τους, στην εργασία [RR95], παρουσιάζουν μια σύντομη εισαγωγή στις στρατηγικές επιλογής για διαστηματικές μεθόδους για το πρόβλημα της ολικής βελτιστοποίησης. Για να συγκρίνουμε τις στρατηγικές επιλογής είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι όλα τα διαστήματα προέρχονται από ένα δέντρο που προκύπτει από διαδοχικές υποδιαίρεσεις του αρχικού διαστήματος $[x]^0$. Το δέντρο δεν εξαρτάται από την στρατηγική επιλογής, εξαρτάται μόνο από τον τρόπο που γίνεται η υποδιαίρεση.

2.4.1 Oldest-first στρατηγική

Σύμφωνα με την *oldest-first* στρατηγική άμεση προτεραιότητα έχει το διάστημα το οποίο έχει παραμείνει περισσότερο χρόνο στην λίστα. Έτσι, η λίστα L μπορεί να θεωρηθεί ως μια δομή FIFO (First In First Out) όπως η ουρά. Το επόμενο διάστημα προς επεξεργασία επιλέγεται πάντα από τη κεφαλή της ουράς, ενώ τα νέα υποδιαστήματα προστίθενται στο τέλος της ουράς αναμονής. Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της στρατηγικής είναι ότι όλα τα διαστήματα υποδιαίρονται τακτικά και επομένως μπορεί κανείς να ισχυριστεί ότι το πεδίο τιμών της συνάρτησης f προσεγγίζεται καλώς. Εάν ισχύει $\tilde{f} \neq f^*$ τότε η στρατηγική αυτή τείνει να υποδιαιρεί τα διαστήματα αυτά ξανά, ενώ με οποιαδήποτε άλλη στρατηγική θα

είχαν απορριφθεί χωρίς περαιτέρω υποδιαίρεσεις με χρήση του cut-off test (στην περίπτωση όπου το $\tilde{f}$ έχει μειωθεί αρκετά). Είναι επομένως σαφές ότι και το άνω φράγμα $\tilde{f}$ θα τείνει στο ολικό ελάχιστο f^* με αργότερους ρυθμούς σύγκλισης σε σχέση με άλλες στρατηγικές.

2.4.2 Best-first στρατηγική

Η best-first στρατηγική επιλέγει πάντα το ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ με το μικρότερο κάτω φράγμα $\inf F([x])$ για το πεδίο τιμών της f στο διάστημα $[x]$. Η ιδέα αυτής της στρατηγικής είναι ότι τα διαστήματα όπου το κάτω φράγμα είναι μικρότερο είναι πολύ πιθανό να περιέχουν και το ολικό ελάχιστο. Θεωρούμε ότι το κριτήριο για την εισαγωγή ενός διαστήματος $[x]$ στην λίστα αποτελεσμάτων L^* είναι $w(F([x])) \leq \varepsilon$. Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της στρατηγικής είναι ότι κατά βάση κανένα διάστημα δεν υποδιαίρεείται περισσότερες απ' ό,τι χρειάζεται. Η ιδιότητα αυτή περιγράφεται με το επόμενο θεώρημα [Ber96]:

Θεώρημα 2.4.1 *Χρησιμοποιώντας τον Αλγόριθμο 2.1 με best-first στρατηγική, δεν θα επιλεγεί κανένα ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ με $\inf F([x]) > f^* + \varepsilon$.*

Είναι σημαντικό να επιστημονούμε ότι οποιαδήποτε άλλη στρατηγική για την επιλογή του επόμενου διαστήματος θα εξέταζε επιπλέον και ζεύγη $([x], \inf F([x]))$ με $\inf F([x]) \leq f^*$ εάν το διάστημα $[x]$ δεν ικανοποιούσε το κριτήριο τερματισμού $w(F([x])) \leq \varepsilon$. Φυσικά, για αυτά τα διαστήματα δεν μπορούμε να αποφανθούμε με σιγουριά αν περιέχουν ή όχι σημεία ολικού ελαχίστου, ακόμα και όταν το ολικό ελάχιστο f^* είναι γνωστό εκ των προτέρων. Ωστόσο, με χρήση της best-first στρατηγικής μόνο τα ζεύγη $([x], \inf F([x]))$ όπου $f^* < \inf F([x]) < f^* + \varepsilon$, μπορεί να εξετασθούν χωρίς να είναι απαραίτητο. Στην πράξη όμως το πλήθος αυτών των διαστημάτων είναι μικρό. Αν χρησιμοποιήσουμε οποιαδήποτε από τις άλλες δύο στρατηγικές, κατά κανόνα αρκετά ζεύγη $([x], \inf F([x]))$ με $\inf F([x]) > f^* + \varepsilon$ θα εξεταστούν.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούμε μια υβριδική στρατηγική που συνδυάζει την best-first και oldest-first στρατηγική. Συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος αποθηκεύει τα διαστήματα $[x]$ και το κάτω φράγμα του διαστήματος εγκλεισμού ως ένα ζεύγος $([x], \inf F([x]))$. Τα ζεύγη αποθηκεύονται στην ταξινομημένη λίστα εργασίας με αύξουσα σειρά ως προς το κάτω φράγμα $\inf F([x])$ (πρώτο κριτήριο ταξινόμησης) και με φθίνουσα σειρά ως προς την ηλικία των παραγόμενων διαστημάτων (δεύτερο κριτήριο ταξινόμησης). Επομένως, ένα νέο ζεύγος αποθηκεύεται στην λίστα L σύμφωνα με τους παρακάτω κανόνες ταξινόμησης

- είτε ισχύει $\inf F([w]) \leq \inf F([x]) \leq \inf F([z])$,
- είτε ισχύει $\inf F([x]) < \inf F([z])$, και το ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ είναι το πρώτο στοιχείο της λίστας,
- είτε ισχύει $\inf F([w]) \leq \inf F([x])$, και το ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ είναι το τελευταίο στοιχείο της λίστας,
- είτε το ζεύγος $([x], \inf F([x]))$ είναι μοναδικό στοιχείο της λίστας,

όπου $([w], \inf F([w]))$ και $([z], \inf F([z]))$ είναι το προηγούμενο και το επόμενο ζεύγος του $([x], \inf F([x]))$ στην λίστα L .

Με αυτή την διάταξη μπορούμε να εξοικονομήσουμε υπολογιστικό κόστος όταν διαγράφουμε διαστήματα στο cut-off test (βλέπε Αλγόριθμο 2.2). Όταν έχουμε βρει το πρώτο στοιχείο της λίστας το οποίο μπορεί να διαγραφεί, μπορούμε να διαγράψουμε με ασφάλεια όλα τα επόμενα στοιχεία της λίστας μέχρι το τέλος.

2.4.3 Depth-first στρατηγική

Στην depth-first στρατηγική τα διαστήματα διαχειρίζονται χρησιμοποιώντας μιας δομή LIFO (Last In First Out), όπως είναι η στοίβα. Όταν εξάγεται ένα διάστημα από την στοίβα αντικαθίσταται από δύο νέα υποδιαστήματα. Με αυτό τον τρόπο ένα διάστημα συνεχίζει να υποδιαιρείται μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού.

Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της στρατηγικής είναι ότι το μέγιστο μήκος της λίστας εργασίας είναι συνήθως πολύ μικρότερο από ότι σε άλλες στρατηγικές. Ωστόσο, με χρήση αυτής της στρατηγικής πολλά διαστήματα θα υποδιαιρεθούν χωρίς λόγο. Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα εάν εισάγουμε πάντα πρώτα το αριστερό μέρος του διαστήματος (με διχοτόμηση) στην στοίβα και το ολικό ελάχιστο βρίσκεται στο αριστερό τμήμα του αρχικού διαστήματος αναζήτησης $[x]^0$. Έτσι, όλα τα διαστήματα στο δεξί τμήμα του διαστήματος θα υποδιαιρεθούν χωρίς λόγο.

2.5 Στρατηγικές υποδιαίρεσης διαστήματος

Σε αυτή την ενότητα θα αναφερθούμε σε στρατηγικές που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την υποδιαίρεση ενός διαστήματος προκειμένου να επιτευχθεί η διακλάδωση στον Αλγόριθμο 2.1. Στην βιβλιογραφία, οι περισσότερες διαστηματικές μέθοδοι για ολική βελτιστοποίηση χρησιμοποιούν την μέθοδο της διχοτόμησης για να υποδιαιρέσουν το πολυδιάστατο διάστημα (box). Η κατεύθυνση ως προς την οποία θα γίνει διχοτόμηση καθορίζεται από κριτήρια που έχουν προταθεί στην βιβλιογραφία. Μέχρι σήμερα, η πιο συνηθισμένη τακτική είναι να επιλέγεται η συντεταγμένη διεύθυνσης όπου το διάστημα έχει το μεγαλύτερο πλάτος. Ωστόσο, στις εργασίες τους οι Ratz και Csendes [RC95, CR97] έδειξαν ότι η στρατηγική αυτή δεν είναι πάντα η καλύτερη και πρότειναν πιο αποτελεσματικές στρατηγικές, οι οποίες χρησιμοποιούν πληροφορία πρώτης τάξης παραγώγου. Στον Αλγόριθμο 2.3 παρουσιάζουμε την διαδικασία με την οποία διχοτομείται ένα διάστημα στην πολυδιάστατη περίπτωση. Η κατεύθυνση k επιλέγεται με χρήση της συνάρτησης

Αλγόριθμος 2.3 Διχοτόμηση διαστημάτων

Είσοδος: το διάστημα $[x] \in \mathbb{R}^n$;

Έξοδος: τα υποδιαστήματα $[x]^1$ και $[x]^2$;

$$k = \min \{ j \mid j \in \{1, \dots, n\} \text{ και } D(j) = \max_{i=1}^n D(i) \}$$

$$[x]^1 := [x];$$

$$[x]^2 := [x];$$

$$[x]_k^1 := [\inf([x]_k), m([x]_k)];$$

$$[x]_k^2 := [m([x]_k), \sup([x]_k)];$$

Επέστρεψε τα διαστήματα $[x]^1$ και $[x]^2$;

$$k := \min \left\{ j \mid j \in \{1, 2, \dots, n\} \text{ και } D(j) = \max_{i=1}^n D(i) \right\} \quad (2.5.1)$$

όπου το $D(i)$ καθορίζεται από έναν κανόνα. Στην συνέχεια δίνουμε μερικές από τις επικρατέστερες στρατηγικές διχοτόμησης. Θα συμβολίζουμε με $F' = (F'_1, \dots, F'_n)$ την διανυσματική συνάρτηση εγκλεισμού των μερικών παραγώγων της συνάρτησης f .

Στρατηγική A : Η στρατηγική αυτή ήταν η πρώτη που προτάθηκε στην βιβλιογραφία [Han79, Han80, RR88]. Σύμφωνα με αυτή την στρατηγική η συντεταγμένη διεύθυνσης k καθορίζεται με χρήση της

$$D(i) := w([x]_i). \quad (2.5.2)$$

Με άλλα λόγια, πάντα το διάστημα διχοτομείται ως προς κατεύθυνση όπου το αντίστοιχο διάστημα έχει το μέγιστο μήκος. Η στρατηγική αυτή βασίζεται στην ιδέα ότι με αυτό τον τρόπο δημιουργούνται διαστηματικά διανύσματα που έχουν την μορφή κύβου και οι διάμετροι τείνουν στο μηδέν πολύ γρήγορα. Κατά συνέπεια, μπορεί κανείς να υπολογίσει ένα διάστημα εγκλεισμού για το πεδίο τιμών της συνάρτησης με μεγαλύτερη ακρίβεια. Ωστόσο, η χρήση της (2.5.2) δεν μας καθορίζει μονοσήμαντα μια κατεύθυνση αν το μέγιστο παρουσιάζεται περισσότερες από μια φορές στην (2.5.1). Αυτός είναι και ο λόγος που παίρνουμε το ελάχιστο.

Στρατηγική B : Ο Hansen περιέγραψε μια άλλη στρατηγική [Han92], η οποία αποσκοπεί στην εύρεση της συνιστώσας για την οποία η τιμή της συνάρτησης μεταβάλλεται περισσότερα. Αυτό μπορεί να γίνει υπολογίζοντας τους παράγοντες

$$W_i = \max_{t \in [x]_i} f(m([x]_1), \dots, m([x]_{i-1}), t, m([x]_{i+1}), \dots, m([x]_n)) \\ - \min_{t \in [x]_i} f(m([x]_1), \dots, m([x]_{i-1}), t, m([x]_{i+1}), \dots, m([x]_n))$$

οι οποίοι αναπαριστούν την μεταβολή της συνάρτησης ως προς την i -μεταβλητή. Η ιδέα είναι να διχοτομούμε το διάστημα ως προς την κατεύθυνση i όπου το W_i γίνεται μέγιστο. Ωστόσο, ο υπολογισμός των W_i στην πράξη κοστίζει, γι' αυτό χρησιμοποιούμε ένα άνω φράγμα αυτών

$$W_i \leq w(F'_i([x])) \cdot w([x]_i),$$

το οποίο προκύπτει άμεσα από το Θεώρημα Μέσης Τιμής. Επομένως, σε αυτή την στρατηγική έχουμε

$$D(i) := w(F'_i([x])) \cdot w([x]_i) \quad (2.5.3)$$

Στρατηγική Γ : Η στρατηγική αυτή χρησιμοποιεί, όπως και η στρατηγική B, το διαστηματικό διάνυσμα των παραγώγων προκειμένου να προσδιορίσει ως προς ποια κατεύθυνση θα γίνει η διχοτόμηση. Η στρατηγική αυτή έχει προταθεί από τον Ratz [Rat92] και η βασική ιδέα ήταν να ελαχιστοποιήσει το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού που παράγεται από την μορφή μέσης τιμής⁶:

$$\begin{aligned} w(F_{MVF}([x])) &= w(F_{MVF}([x]) - F(m([x])) \\ &\approx w(F'([x]) \cdot ([x] - m([x]))) \\ &= \sum_{i=1}^n w(F'_i([x]) \cdot ([x]_i - m([x]_i))) \end{aligned}$$

⁶Βλέπε ενότητα 1.7.3

Έτσι, η στρατηγική Γ μπορεί να διατυπωθεί σε συνδυασμό με την (2.5.1) ως

$$D(i) := w(F'_i([x]) \cdot ([x]_i - m([x]_i))) . \quad (2.5.4)$$

Η διαφορά μεταξύ των (2.5.3) και (2.5.4) έγκειται στο γεγονός ότι στην στρατηγική Γ μεγιστοποιείται το πλάτος των πολλαπλασιαζόμενων διαστημάτων. Εύκολα μπορεί να δει κανείς ότι το δεξί μέλος της (2.5.4) μπορεί να γραφεί ως $\max\{|\min F'_i([x])|, |\max F'_i([x])|\} \cdot w([x]_i)$. Σε αυτή την μορφή, η στρατηγική αυτή έχει χρησιμοποιηθεί από διαστηματικές μεθόδους για την επίλυση συστημάτων μη γραμμικών εξισώσεων.

2.6 Διαδικασίες επιτάχυνσης

Ο Αλγόριθμος 2.1 μπορεί να εφαρμοστεί για οποιαδήποτε αντικειμενική συνάρτηση αρκεί να γνωρίζουμε είτε τον τύπο της ή έναν αλγόριθμο προκειμένου να κατασκευάσουμε συναρτήσεις εγκλεισμού. Αξίζει να σημειώσουμε ότι δεν απαιτείται να είναι η συνάρτηση f διαφορίσιμη. Ωστόσο, στην περίπτωση όπου η αντικειμενική συνάρτηση είναι συνεχώς διαφορίσιμη ο Αλγόριθμος 2.1 μπορεί να βελτιωθεί σημαντικά αν χρησιμοποιήσουμε επιπλέον ελέγχους, είτε για να απορρίψουμε περιοχές (διαστήματα), όπου δεν υφίστανται ολικοί ελαχιστοποιητές, ή για να περιορίσουμε την περιοχή αναζήτησης.

Σε αυτή την ενότητα θα περιγράψουμε τις βασικές διαδικασίες επιτάχυνσης (accelerating devices) οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν στον βασικό αλγόριθμο 2.1. Οι κυριότερες διαδικασίες επιτάχυνσης είναι οι κάτωθι:

- το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών (range check),
- το τεστ του ενδιάμεσου σημείου (midpoint test),
- το κριτήριο της μονοτονίας (monotonicity test),
- το κριτήριο της κοιλότητας (concavity test),
- η διαστηματική μέθοδος Newton (interval Newton step),
- τοπικές μέθοδοι αναζήτησης (local search procedures).

2.6.1 Το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών

Θεωρούμε ότι είναι γνωστό ένα ασφαλές άνω φράγμα $\tilde{f}$ για το ολικό ελάχιστο f^* . Στο κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών χρησιμοποιείται η τιμή $\tilde{f}$ ώστε να αποφασιστεί αν τα υποδιαστήματα που προκύπτουν θα εισαχθούν στην λίστα εργασίας L ή όχι. Αν για ένα διάστημα $[y]$ ισχύει $\inf F([y]) > \tilde{f}$ τότε το διάστημα $[y]$ δεν περιέχει ολικό ελαχιστοποιητή. Επομένως, δεν υπάρχει λόγος το διάστημα αυτό να εισαχθεί στην λίστα L και ουσιαστικά αποκλείεται από οποιαδήποτε περαιτέρω εξέταση. Ήδη στον Αλγόριθμο 2.2 έχουμε περιγράψει το cut-off test το οποίο στην ουσία εφαρμόζει το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών για κάθε υποδιάστημα που είναι αποθηκευμένο στην λίστα εργασίας.

Είναι προφανές ότι η αποδοτικότητα του κριτηρίου εξαρτάται άμεσα από το εκτιμώμενο κάτω φράγμα του πεδίου τιμών της f . Αν το κάτω φράγμα είναι αρκετά υποτιμημένο τότε το κριτήριο δεν μπορεί να αποφανθεί και αναγκαστικά το διάστημα εισάγεται στην

λίστα εργασιών. Κατά συνέπεια, για να είναι αποδοτικό το κριτήριο αυτό θα πρέπει η συνάρτηση εγγλεισμού που χρησιμοποιούμε να μας παρέχει το καλύτερο δυνατό κάτω φράγμα για την αντικειμενική συνάρτηση.

Το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών είναι σχετικά ανέξοδο και μπορεί να εφαρμοστεί και σε μη διαφορίσιμες συναρτήσεις.

2.6.2 Το τεστ του ενδιάμεσου σημείου

Το τεστ του ενδιάμεσου σημείου αρχικά προτάθηκε από τους Ichida και Fujii [IF79]. Όπως προαναφέρθηκε, αν γνωρίζουμε ένα άνω φράγμα $\tilde{f}$ για το ολικό ελάχιστο f^* , τότε μπορούμε να διαγράψουμε όλα τα υποδιαστήματα $[y]$ για τα οποία ισχύει

$$\inf F([y]) > \tilde{f} \geq f^*.$$

Το τεστ του ενδιάμεσου σημείου προσδιορίζει ή βελτιώνει ένα άνω φράγμα για το f^* . Αρχικά, θέτουμε $\tilde{f} = +\infty$. Επιλέγουμε ένα διάστημα $[y]$ από την λίστα εργασιών έτσι ώστε να ισχύει $\inf F([y]) < \inf F([z])$ για κάθε διάστημα $[z]$ στην λίστα L . Με άλλα λόγια, επιλέγουμε το διάστημα $[y]$ με το μικρότερο κάτω φράγμα για το πεδίο τιμών της f , το οποίο είναι το πιο πιθανό να περιέχει ολικό ελάχιστο. Έστω, $c = m([y])$ (ή οποιοδήποτε άλλο εσωτερικό σημείο του διαστήματος $[y]$) και υπολογίζουμε το άνω φράγμα $\tilde{f} = \min\{f(c), \tilde{f}\}$. Πρέπει να σημειωθεί ότι ένα τέτοιο ασφαλές άνω φράγμα μπορεί να υπολογιστεί ακόμα και όταν εμφανίζονται σφάλματα στρογγυλοποίησης. Αυτό μπορεί να γίνει αν υπολογίσουμε το $F(c)$ και χρησιμοποιήσουμε το άνω φράγμα από το υπολογιζόμενο διάστημα για να ενημερώσουμε την τιμή του $\tilde{f}$ πιθανώς με μια καλύτερη τιμή. Στην συνέχεια, χρησιμοποιώντας την νέα βελτιωμένη (μικρότερη) τιμή του $\tilde{f}$, μπορούμε να εφαρμόσουμε το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών για όλα τα διαστήματα $[z]$ της λίστας εργασιών L . Το τεστ του ενδιάμεσου είναι σχετικά ανέξοδο και συχνά μας επιτρέπει να διαγράψουμε μεγάλα τμήματα του αρχικού διαστήματος αναζήτησης $[x]$.

Στο Σχήμα 2.2 παρουσιάζουμε την διαδικασία γραφικά στην μια διάσταση. Θεωρούμε ότι η λίστα εργασιών L περιέχει πέντε διαστήματα. Όπως φαίνεται στο σχήμα στην συγκεκριμένη περίπτωση τα διαστήματα $[y]_1$, $[y]_3$ και $[y]_5$ θα διαγραφούν από την λίστα εργασιών. Φυσικά, το τεστ του ενδιάμεσου σημείου μπορεί να εφαρμοστεί επιλέγοντας ένα αυθαίρετο $c' \in [y]$ αντί του $c = m([y])$. Επιπλέον, μπορεί κανείς να επεκτείνει το τεστ του ενδιάμεσου χρησιμοποιώντας μια τοπική μέθοδο βελτιστοποίησης προκειμένου να βρει ένα σημείο $c' \in [y]$ το οποίο θα δώσει ένα μικρότερο άνω φράγμα για την f . Στο Σχήμα 2.2 έχουμε υπολογίσει την συνάρτηση f στο $c = m([y]_2)$ για να πάρουμε το $\tilde{f}$. Παρατηρούμε ότι, αν υπολογίζαμε την τιμή της συνάρτησης σε ένα σημείο c αριστερά από το $m([y]_4)$ το άνω φράγμα $\tilde{f}$ θα ήταν μικρότερο. Η τιμή του $\tilde{f}$ χρησιμοποιείται επίσης όταν εισάγουμε τα νέα υποδιαίρεμένα διαστήματα $[w]$ στην λίστα εργασιών L . Αν για ένα υποδιάστημα $[w]$ ισχύει ότι $\inf F([w]) > \tilde{f}$, τότε το $[w]$ δεν περιέχει ολικό ελαχιστοποιητή. Επομένως, στην λίστα εργασιών L εισάγονται μόνο τα διαστήματα $[w]$ για τα οποία ισχύει $\inf F([w]) \leq \tilde{f}$.

2.6.3 Κριτήριο μονοτονίας

Το κριτήριο της μονοτονίας μπορεί να εφαρμοστεί για συναρτήσεις που είναι συνεχώς διαφορίσιμες. Έστω ότι $F' = (F'_1, \dots, F'_n)^T$ είναι μια συνάρτηση εγγλεισμού της διανυ-

Σχήμα 2.2. Τεστ ενδιάμεσου σημείου

σματικής συνάρτησης $\nabla f = g = (g_1, \dots, g_n)^T$.

Υποθέτουμε ότι ένας ολικός ελαχιστοποιητής x^* βρίσκεται στο εσωτερικό του αρχικού διαστήματος $[x]^0$, τότε προφανώς το x^* είναι και τοπικό ελάχιστο της αντικειμενικής συνάρτησης. Εάν η συνάρτηση f είναι αυστηρά μονότονη σε ένα δοθέν διάστημα $[x] \subseteq [x]^0$, δηλαδή, $g_i(x) < 0$ ή $g_i(x) > 0$ για κάποιο $i \in \{1, \dots, n\}$ και για κάθε $x \in [x]$, τότε το διάστημα $[x]$ δεν περιέχει σημείο στασιμότητας και επομένως ούτε τοπικά ή ολικά ελάχιστα.

Επομένως, στο κριτήριο της μονοτονίας αρκεί να ελέγξουμε αν για μια τουλάχιστον συνιστώσα $i \in \{1, \dots, n\}$ ισχύει

$$0 \notin F'_i([x]). \quad (2.6.1)$$

Εφόσον η F' είναι συνάρτηση εγκλεισμού του ανάδελτα της f , η συνθήκη (2.6.1) συνεπάγεται ότι θα ισχύει $g_i(x) < 0$ ή $g_i(x) > 0$ για κάθε $x \in [x]$. Έτσι, αφού το ολικό ελάχιστο βρίσκεται στο εσωτερικό του $[x]^0$, το διάστημα $[x]$ μπορεί να εξαιρεθεί από περαιτέρω επεξεργασία.

Αν τώρα, ισχύει ότι $F'_i([x]) \leq 0$ ή $F'_i([x]) \geq 0$ τότε το ολικό ελάχιστο μπορεί να εμφανίζεται στο σύνορο του διαστήματος $[x] \in \mathbb{IR}^n$:

$$\begin{aligned} &([x]_1, \dots, [x]_{i-1}, \sup([x]_i), [x]_{i+1}, \dots, [x]_n)^T, \\ &([x]_1, \dots, [x]_{i-1}, \inf([x]_i), [x]_{i+1}, \dots, [x]_n)^T, \end{aligned}$$

Τότε προφανώς η συνάρτηση λαμβάνει την μικρότερη τιμή της στο σύνορο αλλά μπορεί επίσης να είναι σταθερή στην διεύθυνση i στο εσωτερικό του $[x]$ και επομένως μπορεί να υπάρχουν και άλλοι ολικοί ελαχιστοποιητές. Σε αυτή την περίπτωση λοιπόν, δεν αρκεί να εξετάσουμε μόνο το σύνορο όταν ψάχνουμε όλα τα σημεία ολικού ελαχίστου.

Αν τώρα το ολικό ελάχιστο δεν βρίσκεται στο εσωτερικό του διαστήματος $[x]$ αλλά στο σύνορο, τότε το κριτήριο της μονοτονίας μπορεί να τροποποιηθεί. Έτσι, αντί να εξαι-

ρούμε το διάστημα στην περίπτωση όπου $0 \notin F'_i([x])$ θα πρέπει να ελέγξουμε αν ισχύει

$$F'_i([x]) \leq 0 \quad \text{για το } ([x]_1, \dots, [x]_{i-1}, \sup([x]_i), [x]_{i+1}, \dots, [x]_n)^T,$$

ή

$$F'_i([x]) \geq 0 \quad \text{για το } ([x]_1, \dots, [x]_{i-1}, \inf([x]_i), [x]_{i+1}, \dots, [x]_n)^T.$$

Αν ισχύει μια από τις παραπάνω, τότε μπορούμε να ελαττώσουμε την διάσταση i στο αντίστοιχο σύνολο, διαφορετικά, το διάστημα διαγράφεται. Η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται αναλυτικά στον Αλγόριθμο 2.4 για την μονοδιάστατη περίπτωση ενώ στον Αλγόριθμο 2.5 περιγράφεται η διαδικασία την πολυδιάστατη περίπτωση.

Σχήμα 2.3. Κριτήριο μονοτονίας

Στο Σχήμα 2.3 απεικονίζεται το κριτήριο της μονοτονίας στη μονοδιάστατη περίπτωση για πέντε υποδιαστήματα $[y]_1, \dots, [y]_5$ του διαστήματος $[x]$. Σε αυτή την ειδική περίπτωση, το υποδιάστημα $[y]_1$ μπορεί να εκφυλιστεί στο κάτω άκρο του διαστήματος $[x]$, το υποδιάστημα $[y]_2$ παραμένει όπως είναι, ενώ το υποδιάστημα $[y]_3$ μπορεί να διαγραφεί αφού η συνάρτηση είναι γνησίως φθίνουσα. Τα υποδιαστήματα $[y]_4$ και $[y]_5$ δεν μπορούν να διαγραφούν γιατί $0 \in F'([y]_4)$ και $0 \in F'([y]_5)$. Σε αυτό το συγκεκριμένο παράδειγμα, το κριτήριο μονοτονίας έχει μειώσει το μήκος της λίστας εργασίας L από τα πέντε υποδιαστήματα $[y]_1, [y]_2, [y]_3, [y]_4$ και $[y]_5$ σε τέσσερα υποδιαστήματα $[x]$, $[y]_2$, $[y]_4$ και $[y]_5$. Αν επιπλέον εφαρμόσουμε το τεστ του ενδιάμεσου σημείου στα διαστήματα $[x]$ και $[y]_4$ τότε τα διαστήματα $[x]$ και $[y]_2$ θα διαγραφούν από την λίστα και θα απομείνουν τελικά τα υποδιαστήματα $[y]_4$ και $[y]_5$.

Το κριτήριο της μονοτονίας κοστίζει μόνο έναν συναρτησιακό υπολογισμό $F'([y])$ και όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.3 συχνά μας επιτρέπει να διαγράψουμε μεγάλα τμήματα του αρχικού διαστήματος αναζήτησης $[x]$.

Αλγόριθμος 2.4 Έλεγχος μονοτονίας στην μονοδιάστατη περίπτωση.

```
CheckMonotonicity( $[y]$ ,  $F'([y])$ ,  $[x]$ ,  $[w]$ )  
1: if  $0 \in F'([y])$  then  
2:    $[w] := [y]$ ;  
3: else if  $\inf F'([y]) > 0$  and  $\underline{x} = \underline{y}$  then  
4:    $[w] := [\underline{y}, \underline{y}]$ ;  
5: else if  $\sup F'([y]) < 0$  and  $\bar{x} = \bar{y}$  then  
6:    $[w] := [\bar{y}, \bar{y}]$ ;  
7: else  
8:    $[w] := \emptyset$ ;  
9: end if  
10: return  $[w]$ ;
```

Αλγόριθμος 2.5 Έλεγχος μονοτονίας στην πολυδιάστατη περίπτωση.

```
MultiCheckMonotonicity( $[y]$ ,  $F'$ ,  $[x]$ ,  $[w]$ , monotone)  
1: monotone := 1;  
2: for  $i := 1$  to  $n$  do  
3:   CheckMonotonicity( $[y]_i$ ,  $F'_i$ ,  $[x]_i$ ,  $[w]_i$ )  
4:   if  $[w]_i = \emptyset$  then  
5:     return monotone := 0;  
6:   end if  
7: end for  
8: return  $[w]$ , monotone;
```

2.6.4 Το κριτήριο της κοιλότητας

Όταν η αντικειμενική συνάρτηση f είναι δύο φορές διαφορίσιμη, τότε με χρήση της συνάρτησης εγκλεισμού F'' της Εσσιανής μπορούμε να εντοπίσουμε περιοχές όπου η συνάρτηση είναι κοίλη και επομένως να τις εξαιρέσουμε από περαιτέρω διερεύνηση. Ωστόσο, πρέπει να αναφερθεί ότι ο υπολογισμός της Εσσιανής είναι μια διαδικασία που απαιτεί συνήθως μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Συγκεκριμένα, αν χρησιμοποιήσουμε *εμπρόσθια αυτόματη διαφορίση* (forward automatic differentiation) η πολυπλοκότητα είναι $\mathcal{O}(n^2 \cdot L(f))$ ενώ με χρήση *οπίσθιας αυτόματης διαφορίσης* (reverse automatic differentiation) η πολυπλοκότητα είναι $\mathcal{O}(n \cdot L(f))$, όπου n είναι ο αριθμός των ανεξάρτητων μεταβλητών και $L(f)$ μια σταθερά που εξαρτάται από πλήθος των βασικών πράξεων που χρειάζεται για να υπολογιστεί η συνάρτηση f [KI88].

Σύμφωνα με το κριτήριο της *κοιλότητας* (concavity test), αν η συνάρτηση f είναι κοίλη σε ένα υποδιάστημα $[y] \subseteq [x]$, τότε το διάστημα $[y]$ δεν περιέχει ολικό ελάχιστο στο εσωτερικό του. Μια συνάρτηση είναι κυρτή στο διάστημα $[y]$ εάν η δεύτερη παράγωγος είναι θετική ή μηδέν. Επομένως, αν η f ικανοποιεί την συνθήκη

$$\sup F''([y]) < 0,$$

τότε η f είναι κοίλη στο διάστημα $[y]$ και επομένως το υποδιάστημα $[y]$ μπορεί να διαγραφεί (με εξαίρεση τα άκρα του διαστήματος αναζήτησης $[x]$).

Σχήμα 2.4. Κριτήριο κοιλότητας.

Το Σχήμα 2.4 καταδεικνύει το κριτήριο της κοιλότητας για την μονοδιάστατη περίπτωση. Σε αυτή την περίπτωση, το υποδιάστημα $[y]_1$ μπορεί να εκφυλιστεί στο κάτω άκρο $\underline{x}$ του διαστήματος $[x]$, το $[y]_2$ παραμένει όπως είναι, το $[y]_3$ μπορεί να διαγραφεί, το $[y]_4$ παραμένει όπως είναι, ενώ το $[y]_5$ μπορεί να εκφυλιστεί στο άνω άκρο $\bar{x}$ του διαστήματος $[x]$. Σε αυτό το παράδειγμα, το κριτήριο της κοιλότητας μείωσε αισθητά το διάστημα αναζήτησης για το ολικό ελάχιστο (τα εναπομείναντα υποδιαστήματα είναι $[\underline{x}]$, $[y]_2$, $[y]_4$ και $[\bar{x}]$). Το υπολογιστικό κόστος σε αυτή την περίπτωση ήταν πέντε συναρτησιακοί υπολογισμοί της f'' με χρήση διαστηματικής αριθμητικής.

Ομοίως, όταν η αντικειμενική συνάρτηση f είναι πολλών μεταβλητών, για να είναι κυρτή θα πρέπει ο Εσσιανός πίνακας να είναι θετικά ημιορισμένος. Επομένως, όλα τα διαγώνια στοιχεία του Εσσιανού πίνακα θα πρέπει να είναι μη αρνητικά. Έστω ο διαστηματικός Εσσιανός πίνακας $[H] = \nabla^2 F([y])$, αν ισχύει

$$\sup H_{ii} < 0 \text{ για κάποιο } i = 1, \dots, n,$$

τότε αυτό συνεπάγεται $H_{ii} < 0$, όπου $H = \nabla^2 f(y)$, για κάθε $y \in [y]$. Επομένως, η συνάρτηση f δεν μπορεί να είναι κυρτή στο $[y]$ και κατά συνέπεια, το διάστημα $[y]$ δεν περιέχει σημείο ολικού ελαχίστου, άρα, το διάστημα $[y]$ μπορεί να διαγραφεί.

2.6.5 Η διαστηματική μέθοδος του Νεύτωνα

Η *διαστηματική μέθοδος του Νεύτωνα* (interval Newton method) είναι μια ολική μέθοδος για την εύρεση όλων των ριζών μιας μη γραμμικής εξίσωσης $f(x) = 0$, όταν η f είναι συνεχώς διαφορίσιμη και $x \in [x]$. Το ακόλουθο θεώρημα συνοψίζει τις πιο σημαντικές ιδιότητες της διαστηματικής μεθόδου του Νεύτωνα.

Θεώρημα 2.6.1 Έστω $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνεχής και διαφορίσιμη συνάρτηση και έστω $[x] \in \mathbb{IR}$ ένα διάστημα τέτοιο ώστε $[x] \subseteq \mathcal{D}$. Τότε, το παραγόμενο διάστημα

$$N([x]) = m([x]) - \frac{f(m([x]))}{F'([x])}$$

έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. Για κάθε ρίζα $x^* \in [x]$ της f ισχύει ότι $x^* \in N([x])$.
2. Αν $N([x]) \cap [x] = \emptyset$, τότε δεν υπάρχει ρίζα της f στο διάστημα $[x]$.
3. Αν $N([x]) \overset{\circ}{\subset} [x]$, τότε υπάρχει μια μοναδική ρίζα της f στο $[x]$ και επομένως και στο $N([x])$.

Τις αποδείξεις των παραπάνω ιδιοτήτων μπορεί κανείς να τις βρει σε κλασικά βιβλία διαστηματικής ανάλυσης [Μοο66], [Han92], ή [Neu90]. Πρέπει να σημειωθεί ότι οι συνθήκες του Θεωρήματος 2.6.1 μπορούν να επαληθευτούν άμεσα με χρήση υπολογιστή. Από την άλλη μεριά, αν οι συνθήκες 2 και 3 του Θεωρήματος δεν ικανοποιούνται, τότε το διάστημα $[x]$ μπορεί να περιέχει μία ή περισσότερες ρίζες.

Σχήμα 2.5. Ένα βήμα της διαστηματικής μέθοδου του Νεύτωνα, $0 \notin F'([x]^{(k)})$.

Στο Σχήμα 2.5 παρουσιάζουμε την γεωμετρική ερμηνεία της διαστηματικής μεθόδου του Νεύτωνα όταν $0 \notin F'([x]^{(k)})$, ενώ στο Σχήμα 2.6 παρουσιάζουμε την γεωμετρική ερμηνεία της επεκταμένης⁷ μεθόδου όπου $0 \in F'([x]^{(k)})$.

Όταν η αντικειμενική συνάρτηση είναι δύο φορές παραγωγίσιμη, $f \in C^2$, για να επιταχύνουμε τον Αλγόριθμο 2.1 μπορούμε να εφαρμόσουμε την επεκταμένη μέθοδο του Νεύτωνα στην εξίσωση της παραγώγου

$$f'(y) = 0, \quad y \in [y]. \quad (2.6.2)$$

Εφαρμόζοντας ένα βήμα της επεκταμένης μεθόδου του Νεύτωνα έχουμε

$$N'([y]) = m([y]) - \frac{f'(m([y]))}{F''([y])}, \quad (2.6.3)$$

⁷βλέπε ενότητα 1.4, όπου περιγράφεται η επεκταμένη διαστηματική αριθμητική.

Σχήμα 2.6. Ένα βήμα της επεκταμένης μέθοδου του Νεύτωνα, $0 \in F'([x]^{(k)})$.

και υπολογίζουμε

$$[y_N] = [y] \cap N'([y]), \quad (2.6.4)$$

όπου το $[y_N]$ είναι είτε ένα πεπερασμένο διάστημα, είτε ένωση δύο πεπερασμένων διαστημάτων, ή το κενό σύνολο. Έτσι, ένα βήμα της Newton μπορεί να απαλείψει τμήματα του $[y]$ τα οποία δεν περιέχουν στάσιμο σημείο της f . Πρέπει να σημειωθεί ότι δεν εφαρμόζουμε την μέθοδο του Νεύτωνα για πολλές επαναλήψεις. Σε αντίθετη περίπτωση θα υπολογίζαμε όλα τα στάσιμα σημεία τα οποία δεν είναι απαραίτητα και ελαχιστοποιητές.

Αν θέλαμε να συγκρίνουμε το υπολογιστικό κόστος που απαιτείται από ένα βήμα της μεθόδου Newton, σε σχέση με τις προηγούμενες διαδικασίες επιτάχυνσης που έχουμε περιγράψει, θα μπορούσαμε να ισχυριστούμε ότι σίγουρα ένα βήμα της Newton είναι πολύ πιο δαπανηρό από το τεστ του ενδιαμέσου σημείου, το κριτήριο μονοτονίας ή το κριτήριο της κοιλότητας. Ωστόσο, πολύ συχνά είναι πιο αποτελεσματικό να μειώσουμε το πλάτος των υποδιαστημάτων (σε εκφυλισμένα διαστήματα) όπου η υπερεκτίμηση από τους υπολογισμούς με χρήση διαστηματικής αριθμητικής είναι αμελητέα.

Στο Κεφάλαιο 4 θα παρουσιάσουμε μία νέα διαδικασία επιτάχυνσης η οποία βασίζεται στην ιδέα της διαστηματικής μεθόδου του Νεύτωνα και αποσκοπεί στην απαλοιφή περιοχών όπου με σιγουριά δεν υφίστανται ολικοί ελαχιστοποιητές. Επιπλέον, η διαδικασία αυτή δεν χρειάζεται δεύτερης τάξης πληροφορία και χρησιμοποιεί τις ήδη υπάρχουσες πληροφορίες για να επιταχύνει την διαδικασία αναζήτησης ολικών ελαχιστοποιητών. Η γεωμετρική ερμηνεία της προτεινόμενης διαδικασίας παρουσιάζει ομοιότητες με τη διαστηματική μέθοδο του Νεύτωνα (βλέπε Κεφάλαιο 4).

Στη συνέχεια θα δώσουμε μια σύντομη περιγραφή της διαστηματικής μεθόδου του Νεύτωνα στην πολυδιάστατη περίπτωση. Σε αυτή την περίπτωση, έχουμε να λύσουμε το μη γραμμικό σύστημα

$$\nabla f(y) = 0, \quad y \in [y].$$

Το n -διάστατο διάστημα $[y]$ είναι υποψήφιο να εμπεριέχει έναν ελαχιστοποιητή x^* , οπότε θα πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση $\nabla f(x^*) = 0$. Εάν εφαρμόσουμε την διαστηματική μέθοδο του Νεύτωνα στο παραπάνω σύστημα, τρία πράγματα μπορούν να συμβούν. Πρώτον,

μπορούμε να αποδείξουμε ότι το $[y]$ δεν περιέχει στάσιμο σημείο και σε αυτή την περίπτωση να απορρίψουμε το $[y]$. Δεύτερον, ένα βήμα της μεθόδου Newton μπορεί να περιορίσει σημαντικά το χωρίο αναζήτησης ώστε να προκύψει ένα σχετικά μικρό διάστημα. Έτσι, η συνάρτηση εγγλεισμού της f θα δώσει καλύτερα φράγματα (μικρότερη υπερεκτίμηση) για το πεδίο τιμών και κατά συνέπεια το τεστ του ενδιαμέσου σημείου, το κριτήριο της μονοτονίας ή της κοιλότητας να είναι είναι πιο αποδοτικά. Τρίτον, μπορούμε να διασπάσουμε το διαστηματικό διάνυσμα $[y]$ σύμφωνα με τα διάκενα που δημιουργούνται σε κάθε συνιστώσα λόγω της επεκταμένης διαίρεσης. Εφαρμόζουμε μόνο ένα βήμα της μεθόδου Newton επειδή είναι σχετικά ακριβή αναφορικά με το υπολογιστικό κόστος που απαιτείται, ενώ άλλα τεστ (σε συνδυασμό μόνο με διχοτόμηση) θα μπορούσαν να απαλείψουν ακόμα και περιοχές οι οποίες περιέχουν τοπικά ελάχιστα.

Για να εφαρμόσουμε την επεκταμένη μέθοδο Newton (λύνοντας το διαστηματικό γραμμικό σύστημα με Gauss-Seidel) πρώτα υπολογίζουμε το $[A] \in \mathbb{IR}^{n \times n}$ και $b \in \mathbb{IR}^n$ από τις σχέσεις

$$[A] = R \cdot \nabla^2 F([y]) \quad \text{και} \quad b = R \cdot \nabla F(m([y])),$$

όπου $R \approx [m(\nabla^2 F([y]))]^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ο πίνακας προσυνθήκης (precondition). Στην συνέχεια υπολογίζουμε το διαστηματικό διάνυσμα $N'_{GS}([y])$ επιλύοντας το διαστηματικό γραμμικό σύστημα, συνοπτικά έχουμε

$$\left. \begin{aligned} [z] &= [y] \\ [z]_i &= \left(c_i - \left(b_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n [A]_{ij} \cdot ([z]_j - c_j) \right) / [A]_{ii} \right) \cap [z]_i, \\ &\quad i = 1, \dots, n \\ N'_{GS}([y]) &= [z] \end{aligned} \right\} \quad (2.6.5)$$

Αν κατά την επίλυση του γραμμικού συστήματος, το διάστημα A_{ii} περιέχει το μηδέν τότε η χρήση της επεκταμένης διαίρεσης θα έχει ως αποτέλεσμα την διάσπαση της συνιστώσας $[z]_i$ σε δύο υποδιαστήματα (αφού έχει αφαιρεθεί ένα εσωτερικό του τμήμα που δεν περιέχει λύση). Σε αυτή την περίπτωση, αποθηκεύουμε το ένα τμήμα του χωρίου $[z]$, και χρησιμοποιούμε το άλλο τμήμα για να συνεχίσουμε τους υπολογισμούς στην (2.6.5). Επομένως, ένα βήμα της μεθόδου Newton παράγει το πολύ $n + 1$ υποπεριοχές (διαστηματικά διανύσματα), τα οποία θα αποθηκευτούν στην συνέχεια στην λίστα εργασίας L .

2.6.6 Τοπικές μέθοδοι αναζήτησης

Όσο γρηγορότερα βρούμε μια μικρότερη συναρτησιακή τιμή για το άνω φράγμα $\tilde{f}$, τόσο λιγότερο υπολογιστικό κόστος έχουμε. Ένα αυστηρό άνω φράγμα $\tilde{f}$ για το f^* μπορεί να κάνει το cut-off test⁸ πιο αποδοτικό και κατά συνέπεια θα περιορίζε σημαντικά το μήκος της λίστας εργασίας L .

Επομένως, είναι λογικό να χρησιμοποιήσουμε τοπικές μεθόδους βελτιστοποίησης για να επιτύχουμε ένα καλό άνω φράγμα $\tilde{f}$. Έστω ότι ο συναρτησιακός υπολογισμός στο κέντρο του διαστήματος $[x]$ επιτυγχάνει να βελτιώσει το άνω φράγμα $\tilde{f}$. Τότε, αν η αντικειμενική συνάρτηση είναι συνεχώς διαφορίσιμη, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε π.χ. την μέθοδο της

⁸Βλέπε Αλγόριθμο 2.2, σελίδα 28.

πιο απότομης καθόδου (steepest descent) ή πιο αποδοτικές μεθόδους [SKG02], [KSG04], για να βρούμε μια μικρότερη συναρτησιακή τιμή.

Πρέπει να σημειωθεί ότι το x^* δεν είναι απαραίτητα εντός του $[x]$, επομένως, αν κάποια επανάληψη του αλγορίθμου μας δώσει ένα σημείο που δεν ανήκει στο $[x]$ διακόπτουμε την τοπική μέθοδο αναζήτησης.

Κεφάλαιο 3

Βέλτιστα κέντρα & Βέλτιστες μορφές μέσης τιμής

Σε αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε μια απλή μέθοδο για τον εγκλεισμό του πεδίου τιμών μιας πραγματικής συνάρτησης. Συγκεκριμένα, θα μελετήσουμε την μορφή μέσης τιμής και θα παράγουμε τα βέλτιστα κέντρα για τα οποία η μορφή μέσης τιμής παρουσιάζει το μεγαλύτερο κάτω φράγμα και το μικρότερο άνω φράγμα. Επιπλέον, αποδεικνύουμε την εικασία του Baumann αναφορικά με το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού που παράγεται από τη μορφή μέσης τιμής. Τέλος, προτείνουμε ένα υπολογιστικό κριτήριο για την επιλογή της συνάρτησης εγκλεισμού έτσι ώστε να λαμβάνονται καλύτερα κάτω φράγματα για το πεδίο τιμών μιας συνάρτησης f . Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο έχουν καταγραφεί στις εργασίες [SG05] και [SG01].

3.1 Βασικό κίνητρο μελέτης των μορφών μέσης τιμής

Όπως ήδη έχουμε αναφέρει στην Ενότητα 1.7.3, η μορφή μέσης τιμής (mean value form) ορίζει μια συνάρτηση εγκλεισμού για το πεδίο τιμών της συνάρτησης f τετραγωνικής σύγκλισης ($\alpha = 2$). Το πρόσφατο ερευνητικό αποτέλεσμα του Hertling [Her02], αναφορικά με την κατασκευή συναρτήσεων εγκλεισμού ανώτερης τάξης ($\alpha > 2$), μας αποτρέπει να αναζητήσουμε συναρτήσεις εγκλεισμού, οι οποίες θα προσέγγιζαν το πεδίο τιμών μιας συνάρτησης με σφάλμα μικρότερο της τετραγωνικής τάξης. Ωστόσο, οι υποθέσεις του θεωρήματος του Hertling αποτέλεσαν το βασικό κίνητρο για την ενασχόληση μας με την διερεύνηση των βέλτιστων κέντρων (optimal centers) της μορφής μέσης τιμής. Όπως θα δούμε στην συνέχεια, τα παραγόμενα βέλτιστα κέντρα παίζουν καθοριστικό ρόλο όχι μόνο για την προσέγγιση του πεδίου τιμών αλλά και στην διαδικασία αναζήτησης του ολικού ελαχίστου (βλέπε Κεφάλαιο 4).

Στη συνέχεια δίνουμε το βασικό αποτέλεσμα της εργασίας του Hertling σε απλουστευμένη μορφή για την μονοδιάστατη περίπτωση ($n = 1$):

Θεώρημα 3.1.1 ([Her02]) Έστω ότι $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}$ είναι ανοιχτό σύνολο, η συνάρτηση $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ δυο φορές συνεχώς διαφορίσιμη και $z \in \mathcal{D}$ είναι ένα σημείο όπου $f'(z) = 0$ και $f''(z) \neq$

0. Αν F είναι μια συνάρτηση εγκλεισμού της f και $\tilde{c} > 0$ μια σταθερά τέτοια ώστε το διάστημα εγκλεισμού $F([z - \tilde{c}, z + \tilde{c}])$ να είναι καλώς ορισμένο και $F([z - \delta, z + \delta]) \supseteq f([z - \delta, z + \delta])$ για κάθε $\delta \in [0, \tilde{c})$, τότε υπάρχει ένα $c > 0$ έτσι ώστε για κάθε $\delta \in [0, c)$ να ισχύει

$$q(F([z - \delta, z + \delta]), f([z - \delta, z + \delta])) \geq \frac{|f''(z)|}{4} \cdot \delta^2$$

Με απλά λόγια, το παραπάνω θεώρημα δηλώνει ότι εάν υπάρχει σημείο z στο πεδίο ορισμού της f τέτοιο ώστε $f'(z) = 0$ και $f''(z) \neq 0$ τότε δεν μπορεί κανείς να επιτύχει προσέγγιση του πεδίου τιμών με σφάλμα μικρότερο της τετραγωνικής τάξης όταν χρησιμοποιεί διαστηματική αριθμητική για να εκτιμήσει άνω και κάτω φράγματα για το πεδίο τιμών.

Η ενασχόληση μας με τις μορφές μέσης τιμής έγκειται στο Θεώρημα 3.1.1 από όπου οδηγηθήκαμε στην παραγωγή των βέλτιστων κέντρων με χρήση πρώτης τάξης πληροφορία. Παρατηρούμε ότι, καθώς το πλάτος των διαστημάτων τείνει στο μηδέν $w([x]) \rightarrow 0$, τα βέλτιστα κέντρα τείνουν με μεγάλη ακρίβεια στα σημεία z όπου $f'(z) = 0$. Είναι λογικό λοιπόν να σκεφτεί κανείς ότι, υποδιαϊρώντας το αρχικό διάστημα αναζήτησης στα σημεία z μπορεί να επιτευχθεί τάξη σύγκλισης $\alpha > 2$ για το πεδίο τιμών στα επιμέρους υποδιαστήματα. Αυτή είναι και η βασική ιδέα για το πως μπορεί να επιτευχθεί η διακλάδωση στον Αλγόριθμο 2.1 αντί της διχοτόμησης. Η στρατηγική αυτή αναπτύσσεται στο Κεφάλαιο 4.

3.2 Η μορφή της μέσης τιμής

Η μορφή μέσης τιμής είναι ένας συγκεκριμένος τύπος συνάρτησης εγκλεισμού, εκτός της φυσικής επέκτασης F , που παρέχει φράγματα για το πεδίο τιμών $f([x])$ της αντικειμενικής συνάρτησης f . Ο ορισμός της μορφής μέσης τιμής F_{MVF} της f είναι ο ακόλουθος (βλέπε [Mo06b, Neu90]):

Ορισμός 3.2.1 Έστω ότι $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση, $[x] \subseteq \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}$ και F' ένα διάστημα εγκλεισμού της f' στο $[x]$. Η συνάρτηση εγκλεισμού $F_{MVF} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ της f στο $[x]$, που ορίζεται από την εξίσωση

$$F_{MVF}([x], c) = f(c) + F'([x]) \cdot ([x] - c), \quad (3.2.1)$$

καλείται μορφή μέσης τιμής της f στο $[x]$ με κέντρο c .

Η μορφή μέσης τιμής εξαρτάται από την παράγωγο f' της f , συνεπώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο αν η συνάρτηση είναι διαφορίσιμη. Συνεπώς, ο υπολογισμός του πεδίου τιμών $f([x])$ της f έχει αναχθεί στο πρόβλημα του υπολογισμού ενός διαστήματος εγκλεισμού $F'([x])$ της f' , το οποίο μπορεί να υπολογιστεί εύκολα εφαρμόζοντας αυτόματη διαφορίση σε συνδυασμό με την διαστηματική αριθμητική [HHKR95]. Στις εργασίες [CM80, Ra183a] έχει δειχθεί ότι η μορφή της μέσης τιμής μας παρέχει δεύτερης τάξης προσέγγιση για το πεδίο τιμών της f , δηλαδή,

$$w(F_{MVF}([x], c)) - w(f([x])) = \mathcal{O}(w([x])^2).$$

Αν θέλαμε να συγκρίνουμε την φυσική επέκταση F της f με την μορφή μέσης τιμής F_{MVF} , θα μπορούσαμε να πούμε ότι η μορφή μέσης τιμής εγγυάται πιο αυστηρά διαστήματα εγκλεισμού όταν το πλάτος του διαστήματος $[x]$ είναι επαρκώς μικρό. Αντιθέτως, η F_{MVF} μπορεί να

υπερεκτιμεί σημαντικά το πεδίο τιμών της f όταν το πλάτος του διαστήματος $[x]$ είναι μεγάλο. Γι' αυτό το λόγο, είναι πάγια τακτική η χρησιμοποίηση της τομής $F_{MVF}([x], c) \cap F([x])$ για μια καλύτερη προσέγγιση του πεδίου τιμών. Μια πιο εκτενής συζήτηση αναφορικά με το θέμα της επιλογής της καλύτερης συνάρτησης εγκλεισμού γίνεται στην Ενότητα 3.4.

Η επιλογή του κέντρου c στη σχέση (3.2.1) παίζει καθοριστικό ρόλο και μας επιτρέπει να ορίσουμε μια ευρύτερη κλάση συναρτήσεων εγκλεισμού. Προφανώς, διαφορετικά κέντρα οδηγούν σε διαφορετικές συναρτήσεις εγκλεισμού. Ωστόσο, στην βιβλιογραφία το κέντρο c επιλέγεται να είναι το κέντρο (ή μέσο) του εκάστοτε διαστήματος για το οποίο θέλουμε να εκτιμήσουμε το πεδίο ορισμού, δηλαδή $c = m([x])$. Η επιλογή αυτή δικαιολογείται για δύο λόγους: i) για $c \neq m([x])$ η μορφή μέσης τιμής δεν είναι πλέον μονότονα εγκλεισμένη, δηλαδή αν $[x] \subseteq [y]$ δεν συνεπάγεται ότι $F_{MVF}([x]) \subseteq F_{MVF}([y])$ και ii) έχει αποδειχτεί ότι για $c = m([x])$ το διάστημα εγκλεισμού που παράγεται από την F_{MVF} έχει την μικρότερη ακτίνα. Πρέπει να σημειώσουμε ότι σε αυτή την περίπτωση, η μορφή μέσης τιμής εκφράζεται ως το άθροισμα της πραγματικής τιμής $f(c)$ και ενός συμμετρικού διαστήματος, άρα το $f(c)$ αποτελεί το κέντρο του διαστήματος εγκλεισμού.

3.3 Βέλτιστες μορφές μέσης τιμής

Στην εργασία [Bau88], ο Baumann εισήγαγε την έννοια της βέλτιστης μορφής. Συγκεκριμένα, όρισε με απλές ασύμμετρες εκφράσεις κέντρα c^- και c^+ για την μορφή της μέσης τιμής και απέδειξε ότι, όταν τα κέντρα αυτά χρησιμοποιηθούν στην μορφή μέσης τιμής, αυτή γίνεται βέλτιστη αναφορικά με το κάτω ή το άνω φράγμα. Στην συνέχεια δίνουμε τον ορισμό της βέλτιστης μορφής της μέσης τιμής.

Ορισμός 3.3.1 Η μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c) = f(c) + F'([x]) \cdot ([x] - c)$ καλείται (i) βέλτιστη ως προς το κάτω φράγμα αν

$$\inf F_{MVF}([x], c) \leq \inf F_{MVF}([x], c^-) \text{ για οποιοδήποτε } c \in [x], \text{ και}$$

(ii) βέλτιστη ως προς το άνω φράγμα αν

$$\sup F_{MVF}([x], c^+) \leq \sup F_{MVF}([x], c) \text{ για οποιοδήποτε } c \in [x].$$

Το σημείο c^- το οποίο παράγει το μεγαλύτερο κάτω φράγμα και το σημείο c^+ το οποίο παράγει το μικρότερο άνω φράγμα μεταξύ όλων των κέντρων καλούνται βέλτιστα κέντρα.

Μολονότι, στην εργασία [Bau88] δεν γίνεται καμία αναφορά για το πως προέκυψαν τα κέντρα c^- και c^+ , πιστεύουμε ότι έχουν προκύψει από την ακόλουθη γεωμετρική ερμηνεία (βλέπε Σχήμα 3.1(a) και Σχήμα 3.1(b)).

Αν υποθέσουμε ότι η συνάρτηση f στο διάστημα $[x] = [\underline{x}, \overline{x}]$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη και $F'([x]) = [\underline{d}, \overline{d}]$ είναι ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου της f , τότε τα βέλτιστα κέντρα c^- και c^+ προκύπτουν, από την τομή των ευθειών που ορίζονται από τα σημεία $(\underline{x}, \underline{d})$ και $(\overline{x}, \overline{d})$ ή $(\underline{x}, \overline{d})$ και $(\overline{x}, \underline{d})$ με τον άξονα $x'x$ όπου η τιμή της παραγώγου είναι μηδέν. Όπως θα δούμε στην συνέχεια, το Λήμμα 3.3.3 δικαιολογεί πλήρως αυτή την γραμμική προσέγγιση της παραγώγου για τετραγωνικές συναρτήσεις.

(a) Γεωμετρική ερμηνεία των βέλτιστων κέντρων c^- και c^+ σύμφωνα με τον Baumann όταν $\bar{d} + \underline{d} > 0$.

(b) Γεωμετρική ερμηνεία των βέλτιστων κέντρων c^- και c^+ σύμφωνα με τον Baumann όταν $\bar{d} + \underline{d} < 0$.

Σχήμα 3.1. Γεωμετρική ερμηνεία των c^- και c^+

Στις εργασίες [CM80, Ral83a] έχει αποδειχθεί ότι αν η F' είναι μονότονα εγγλεισμένη τότε και η F_{MVF} είναι μονότονα εγγλεισμένη, με την προϋπόθεση ότι το κέντρο να είναι πάντα $c = m([x])$. Επομένως, όταν αντί για το $m([x])$ χρησιμοποιήσουμε ένα οποιοδήποτε άλλο κέντρο, η ιδιότητα της μονότονης εγγλεισιμότητας δεν ισχύει πλέον για την F_{MVF} . Ωστόσο, στην εργασία [Bau88] ορίζεται η μονόπλευρη εγγλεισιμότητα που ισχύει για τις βέλτιστες μορφές.

Ορισμός 3.3.2 Έστω F μια συνάρτηση εγγλεισμού της f . Η διαστηματική συνάρτηση θα καλείται μονόπλευρα εγγλεισμένη εάν μια από τις ακόλουθες συνθήκες

$$[x] \subseteq [y] \Rightarrow \inf F([x]) \geq \inf F([y]), \quad (3.3.1)$$

(μονοτονία κάτω φράγματος)

$$[x] \subseteq [y] \Rightarrow \sup F([x]) \leq \sup F([y]), \quad (3.3.2)$$

(μονοτονία άνω φράγματος)

ισχύει για κάθε $[x], [y] \in \mathbb{IR}$.

Με απλά λόγια, η ιδιότητα της μονόπλευρης μονοτονίας απαιτεί ένα τουλάχιστον φράγμα να βελτιώνεται ενώ η μονότονη εγγλεισιμότητα απαιτεί και το κάτω και το άνω φράγμα να βελτιώνονται ταυτοχρόνως. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, αν η μορφή μέσης τιμής υπολογιστεί στα παραγόμενα βέλτιστα κέντρα τότε η βέλτιστη μορφή που ορίζεται ικανοποιεί τον Ορισμό 3.3.2, δηλαδή είναι μονόπλευρα εγγλεισμένη. Η ιδιότητα αυτή μας αρκεί για την ανάπτυξη αλγορίθμων ολικής ελαχιστοποίησης.

3.3.1 Προσδιορισμός των βέλτιστων κέντρων

Σε αυτή την ενότητα θα προσδιορίσουμε τα κέντρα της μορφής μέσης τιμής ώστε να οδηγηθούμε σε βέλτιστες μορφές μέσης τιμής ως προς το κάτω και το άνω φράγμα αντίστοιχα. Η βασική ιδέα είναι να βελτιστοποιήσουμε δύο μη διαφορίσιμες συναρτήσεις και παράλληλα να εξασφαλίσουμε ότι το σημείο ολικού ελαχίστου (μεγίστου) είναι μοναδικό. Για το σκοπό αυτό πρέπει να παράγουμε τις αναλυτικές εκφράσεις του infimum και του supremum της μορφής μέσης τιμής

$$F_{MVF}([x], c) = f(c) + F'([x]) \cdot ([x] - c).$$

Σε ότι ακολουθεί θεωρούμε ότι η αντικειμενική συνάρτηση f είναι μονοδιάστατη. Η γενίκευση για συναρτήσεις πολλών διαστάσεων είναι άμεση. Έτσι, θέτοντας $[x] = [\underline{x}, \bar{x}]$ και $F'([x]) = [\underline{d}, \bar{d}]$ και εφαρμόζοντας τους κανόνες του διαστηματικού πολλαπλασιασμού, το infimum δίνεται από τη σχέση

$$\inf F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \underline{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \min(\underline{d} (\bar{x} - c), \bar{d} (\underline{x} - c)) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.3a)$$

$$\inf F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \bar{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \underline{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \min(\underline{d} (\bar{x} - c), \bar{d} (\underline{x} - c)) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.3b)$$

$$\inf F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \underline{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \min(\underline{d} (\bar{x} - c), \bar{d} (\underline{x} - c)) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.3c)$$

ενώ το supremum είναι

$$\sup F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \max(\underline{d} (\underline{x} - c), \bar{d} (\bar{x} - c)) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.4a)$$

$$\sup F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \max(\underline{d} (\underline{x} - c), \bar{d} (\bar{x} - c)) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.4b)$$

$$\sup F_{MVF}([x], c) = f(c) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ \max(\underline{d} (\underline{x} - c), \bar{d} (\bar{x} - c)) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.4c)$$

Θεώρημα 3.3.1 Έστω $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση με $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}$, $[x] = [\underline{x}, \bar{x}] \subseteq \mathcal{D}$, και $F'([x]) = [\underline{d}, \bar{d}]$ είναι ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου της f στο $[x]$.

(i) Το κάτω φράγμα της μορφής μέσης τιμής παρουσιάζει μέγιστο στο κέντρο

$$c^- = \begin{cases} \bar{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \underline{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) - r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.5a)$$

$$c^- = \begin{cases} \bar{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \underline{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) - r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.5b)$$

$$c^- = \begin{cases} \bar{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \underline{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) - r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.5c)$$

και για όλα τα $c \in [x]$ ισχύει

$$-w(F'([x])) \cdot |c^- - c| \leq \inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) \leq 0. \quad (3.3.6)$$

(ii) Το άνω φράγμα της μορφής μέσης τιμής παρουσιάζει ελάχιστο στο κέντρο

$$c^+ = \begin{cases} \underline{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.7a)$$

$$c^+ = \begin{cases} \underline{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.7b)$$

$$c^+ = \begin{cases} \underline{x} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ \bar{x} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ m([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.7c)$$

και για όλα τα $c \in [x]$ ισχύει

$$0 \leq \sup F_{MVF}([x], c) - \sup F_{MVF}([x], c^+) \leq w(F'([x])) \cdot |c^+ - c|. \quad (3.3.8)$$

Απόδειξη. (i) Αρχικά θα προσδιορίσουμε το κέντρο $c \in [x]$ έτσι ώστε το κάτω φράγμα, που δίνεται από της εξίσωση (3.3.3), να γίνεται μέγιστο. Για ένα δοθέν διάστημα $[x]$, θεωρούμε ότι h είναι μια συνάρτηση του c με $h(c) = \inf F_{MVF}([x], c)$. Σύμφωνα με τον ορισμό της $h(c)$ πρέπει να διακρίνουμε τρεις περιπτώσεις:

a) Αν $\bar{d} \leq 0$, τότε η συνάρτηση h γράφεται ως $h(c) = f(c) + \underline{d} (\bar{x} - c)$. Σε αυτή την περίπτωση, εύκολα αποδεικνύουμε ότι $h'(c) \geq 0$ για κάθε $c \in [x]$, δηλαδή, η συνάρτηση

h είναι μη φθίνουσα στο $[x]$. Επομένως, η συνάρτηση h παρουσιάζει μέγιστο στο σημείο $c = \bar{x}$ όταν $\bar{d} \leq 0$.

b) Αν $\underline{d} \geq 0$, τότε η συνάρτηση h γίνεται $h(c) = f(c) + \bar{d} (\underline{x} - c)$. Παρατηρούμε ότι $h'(c) \leq 0$ για κάθε $c \in [x]$, άρα, η h είναι μη αύξουσα στο διάστημα $[x]$ και επομένως η συνάρτηση h παρουσιάζει μέγιστο στο σημείο $c = \underline{x}$ όταν $\underline{d} \geq 0$.

Σχήμα 3.2. Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων ℓ_1, ℓ_2 , και L όταν $\underline{d} < 0 < \bar{d}$.

c) Αν $\underline{d} < 0 < \bar{d}$ τότε η συνάρτηση h γράφεται:

$$h(c) = f(c) + L(c),$$

όπου

$$L(c) = \min (\ell_1(c), \ell_2(c))$$

$$\ell_1(c) = \underline{d} (\bar{x} - c)$$

$$\ell_2(c) = \bar{d} (\underline{x} - c)$$

Εξ ορισμού η συνάρτηση L είναι μη ομαλή και κατά τμήματα γραμμική στο κλειστό διάστημα $[x]$. Επιπλέον, μπορούμε να δείξουμε ότι είναι κοίλη αφού κάθε γραμμική συνάρτηση είναι και κυρτή και κοίλη. Πράγματι,

$$\begin{aligned} L(\lambda c_1 + (1 - \lambda) c_2) &= \min_{1 \leq i \leq 2} \ell_i(\lambda c_1 + (1 - \lambda) c_2) \\ &\geq \lambda \min_{1 \leq i \leq 2} \ell_i(c_1) + (1 - \lambda) \min_{1 \leq i \leq 2} \ell_i(c_2) \\ &= \lambda L(c_1) + (1 - \lambda) L(c_2), \end{aligned}$$

για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$, $0 \leq \lambda \leq 1$, και για κάθε $c_1, c_2 \in [x]$. Επομένως, κάθε τοπικός μεγιστοποιητής είναι και ολικός. Η γραφική αναπαράσταση των ℓ_1, ℓ_2 και L παρουσιάζεται

στο Σχήμα 3.2. Ο ολικός μεγιστοποιητής c^- της συνάρτησης L , ορίζεται ως η τετμημένη του σημείου τομής των γραμμικών συναρτήσεων ℓ_1 και ℓ_2 . Λαμβάνοντας υπόψη ότι $\underline{x} = m([x]) - r([x])$ και $\bar{x} = m([x]) + r([x])$, μετά από πράξεις καταλήγουμε ότι $c^- = m([x]) - r([x]) \cdot (\bar{d} + \underline{d})/(\bar{d} - \underline{d})$.

Απομένει να δείξουμε ότι ο ολικός μεγιστοποιητής c^- της συνάρτησης L είναι επίσης και ολικός μεγιστοποιητής της συνάρτησης h . Η συνάρτηση h είναι συνεχής στο $[x]$ αλλά όχι διαφορίσιμη στο σημείο c^- αφού η αριστερή και δεξιά παράγωγος στο σημείο αυτό δεν ταυτίζονται. Επιπλέον, η h είναι γνησίως αύξουσα στο ανοιχτό διάστημα $(\underline{x}, c^-)$ και γνησίως φθίνουσα στο $(c^-, \bar{x})$. Άρα, η h παρουσιάζει επίσης μέγιστο στο σημείο c^- και η σχέση (3.3.5) έχει αποδειχτεί σε κάθε περίπτωση.

Στην συνέχεια θα αποδείξουμε τη διπλή ανισότητα (3.3.6) η οποία εγγυάται ότι η μορφή μέσης τιμής γίνεται βέλτιστη αναφορικά με το κάτω φράγμα της. Ας θεωρήσουμε ένα οποιοδήποτε $c \in [x]$ τέτοιο ώστε $c \neq c^-$, τότε έχουμε

$$\inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) = f(c) - f(c^-) + \inf (F'([x]) ([x] - c)) - \inf (F'([x]) ([x] - c^-)). \quad (3.3.9)$$

Από το θεώρημα μέσης τιμής έχουμε $f(c) - f(c^-) \in F'([x])(c - c^-)$, απ' όπου προκύπτουν οι ακόλουθες δύο ανισότητες

$$f(c) - f(c^-) \leq \sup (F'([x]) (c - c^-)) = \max (\underline{d}(c - c^-), \bar{d}(c - c^-)) \quad (3.3.10)$$

και

$$f(c) - f(c^-) \geq \inf (F'([x]) (c - c^-)) = \min (\underline{d}(c - c^-), \bar{d}(c - c^-)). \quad (3.3.11)$$

Έτσι, η (3.3.9) με χρήση της ανισότητα (3.3.10) γίνεται

$$\begin{aligned} \inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) \leq & \max (\underline{d}(c - c^-), \bar{d} \cdot (c - c^-)) + \\ & \min (\underline{d}(\bar{x} - c), \bar{d}(\underline{x} - c)) - \\ & \min (\underline{d}(\bar{x} - c^-), \bar{d}(\underline{x} - c^-)). \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι $\forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$ ισχύουν οι παρακάτω ταυτότητες

$$\min(\alpha_1, \alpha_2) = (\alpha_1 + \alpha_2 - |\alpha_1 - \alpha_2|)/2 \quad \text{και} \quad (3.3.13)$$

$$\max(\alpha_1, \alpha_2) = (\alpha_1 + \alpha_2 + |\alpha_1 - \alpha_2|)/2, \quad (3.3.14)$$

η ανισότητα (3.3.12) μπορεί να γραφεί ως

$$\inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) \leq (|\alpha| - |\beta| + |\gamma|)/2, \quad (3.3.15)$$

όπου

$$\begin{aligned} \alpha &= (\bar{d} - \underline{d})(c^- - c), \\ \beta &= \underline{d}(\bar{x} - c) - \bar{d}(\underline{x} - c), \quad \text{και} \\ \gamma &= \underline{d}(\bar{x} - c^-) - \bar{d}(\underline{x} - c^-). \end{aligned}$$

Ισχύει όμως, λαμβάνοντας υπόψη τον ορισμό του c^- , ότι $\alpha + \beta = \gamma = 0$. Επομένως, $|\alpha| = |\beta|$ και έτσι

$$\inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) \leq 0 \quad \forall c \in [x].$$

Έτσι αποδείξαμε το δεξιό μέλος της διπλής ανισότητας (3.3.6). Το γεγονός ότι η μέγιστη υποεκτίμηση φράσσεται από κάτω από την ποσότητα:

$$-w(F'([x])) \cdot |c^- - c|, \quad \forall c \in [x]$$

μπορεί να αποδειχτεί εύκολα, αν χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση (3.3.9), σε συνδυασμό με την ανισότητα (3.3.11) και την ταυτότητα (3.3.13). Έτσι, μετά από πράξεις καταλήγουμε στην ανίσωση

$$(-|\alpha| - |\beta| + |\gamma|)/2 \leq \inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-). \quad (3.3.16)$$

Αφού $|\alpha| = |\beta|$ και $|\gamma| = 0$, έχουμε ότι

$$-|\alpha| \leq \inf F_{MVF}([x], c) - \inf F_{MVF}([x], c^-) \quad (3.3.17)$$

και αντικαθιστώντας την τιμή του $|\alpha|$ προκύπτει η αποδεικτέα.

(ii) Το βέλτιστο κέντρο c^+ μπορεί να προκύψει ομοίως ελαχιστοποιώντας την συνάρτηση του supremum της μορφής μέσης τιμής που δίνεται από την εξίσωση (3.3.4). Για την απόδειξη της διπλής ανισότητας (3.3.8) ακολουθούμε αντίστοιχα βήματα. ■

Παρατήρηση. Η γενίκευση του Θεωρήματος 3.3.1 για πολυδιάστατες συναρτήσεις είναι άμεση. Τα βέλτιστα κέντρα σε αυτή την περίπτωση υπολογίζονται ανά συνιστώσα. Η απόδειξη του θεωρήματος σε αυτή την περίπτωση γίνεται με όμοιο τρόπο για κάθε $i = 1, \dots, n$.

Από τις (3.3.5) και (3.3.7) είναι προφανές ότι τα κέντρα c^- και c^+ βρίσκονται πάντα εντός του διαστήματος $[x]$ και είναι συμμετρικά ως προς το μέσο σημείο $m([x])$ (βλέπε Σχήμα 3.2). Επιπλέον η σχετική θέση τους εντός του διαστήματος $[x]$ εξαρτάται μόνο από το πρόσημο του αθροίσματος $\bar{d} + \underline{d}$. Συγκεκριμένα, ισχύει ότι

$$\begin{aligned} c^- &< m([x]) < c^+, & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ c^+ &< m([x]) < c^-, & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0 \text{ και} \\ c^- &\equiv m([x]) \equiv c^+, & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} = 0. \end{aligned}$$

3.3.2 Βελτιστότητα αναφορικά με το πλάτος

Είναι εύκολο να αποδείξει κανείς ότι το πλάτος του διαστήματος εγγλεισμού που παράγεται από τη μορφή μέσης τιμής γίνεται ελάχιστο όταν θεωρήσουμε ως κέντρο c το μέσο σημείο, δηλαδή $c = m([x])$ (βλέπε [Neu90]). Αυτός είναι ένας από τους κυριότερους λόγους που χρησιμοποιείται κατά τον υπολογισμούς με διαστήματα όταν θέλουμε να προσεγγίσουμε το πεδίο τιμών μιας συνάρτησης με ένα διάστημα εγγλεισμού. Ωστόσο, το 1986 ο Baumann κατά την εκπόνηση της διδακτορικής του διατριβής, παρατήρησε ότι το πλάτος του διαστήματος εγγλεισμού της (3.2.1) γίνεται ελάχιστο για όλα τα κέντρα που βρίσκονται ανάμεσα στα βέλτιστα κέντρα c^- και c^+ [Neu90, σελ. 75].

Σε αυτή την ενότητα θα αποδείξουμε αυστηρά την εικασία του Baumann. Το κύριο αποτέλεσμα περιγράφεται στο Θεώρημα 3.3.2 όπου αποκαλύπτεται άλλη μια σημαντική ιδιότητα των βέλτιστων μορφών μέσης τιμής. Η απόδειξη του θεωρήματος βασίζεται σε μια απλή ιδέα, η οποία αποτελείται από δύο βήματα. Πρώτον, κατασκευάζουμε μια «κατάλληλη» συνάρτηση πλάτους, η οποία δυστυχώς είναι μη διαφορίσιμη και δεύτερον, υπολογίζοντας αναλυτικά τους ολικούς ελαχιστοποιητές σε ένα minimax πρόβλημα, αποδεικνύουμε τελικά ότι το διάστημα εγγλεισμού παρουσιάζει ελάχιστο πλάτος για κάθε κέντρο που θα επιλεγεί στο κλειστό διάστημα που ορίζουν τα βέλτιστα κέντρα.

Είναι γνωστό ότι ένα διάστημα $[x]$ μπορεί να οριστεί είτε συναρτήσει των άκρων του, δηλαδή $[x] = [\underline{x}, \overline{x}]$, είτε συναρτήσει του μέσου σημείου $m([x])$ και της ακτίνας $r([x])$ του. Για την κατασκευή της συνάρτησης πλάτους χρησιμοποιούμε το σύστημα συντεταγμένων κέντρο-ακτίνα διαστήματος¹. Η επιλογή αυτή διευκολύνει αρκετά και οδηγεί στην πιο σύντομη και απλή απόδειξη της εικασίας.

Το ακόλουθο λήμμα έχει διατυπωθεί από τον Rall [Ral83b, σελ. 222] και αφορά τον πολλαπλασιασμό δύο διαστημάτων όταν αναπαρασταθούν συναρτήσει του κέντρου και της ακτίνας.

Λήμμα 3.3.1 ([Ral83b]) Έστω $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, τότε το γινόμενο των $[a]$ και $[b]$ είναι ένα διάστημα που ορίζεται με κέντρο m_i και ακτίνα r_i έτσι ώστε

$$r_i = \max \{r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6\},$$

όπου τα m_i και r_i ορίζονται ως ακολούθως:

$$\begin{aligned} m_1([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) - r([a]) r([b]), & r_1 &= |m([a]) r([b]) - r([a]) m([b])|, \\ m_2([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) - m([a]) r([b]), & r_2 &= |r([a]) m([b]) - r([a]) r([b])|, \\ m_3([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) + r([a]) r([b]), & r_3 &= |r([a]) m([b]) + m([a]) r([b])|, \\ m_4([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) - r([a]) r([b]), & r_4 &= |r([a]) m([b]) - m([a]) r([b])|, \\ m_5([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) + m([a]) r([b]), & r_5 &= |r([a]) m([b]) + r([a]) r([b])|, \\ m_6([a] \cdot [b]) &= m([a]) m([b]) + r([a]) m([b]), & r_6 &= |m([a]) r([b]) + r([a]) r([b])|, \end{aligned}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι είναι αρκετά δύσκολο να βρούμε αναλυτικό τύπο για το πλάτος $w([a] \cdot [b])$. Ωστόσο, κάνοντας χρήση του παραπάνω λήμματος προκύπτει το παρακάτω πόρισμα.

Πόρισμα 3.3.1 Έστω $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, τότε το πλάτος του διαστήματος $[a] \cdot [b]$ είναι

$$w([a] \cdot [b]) = \max_{i=1, \dots, 6} w_i \quad (3.3.18)$$

¹Το ίδιο τέχνασμα χρησιμοποιούμε και στην απόδειξη της Πρότασης 3.3.1

όπου

$$\begin{aligned}
 w_1 &= |m([a]) w([b]) - w([a]) w([b]) / 2|, \\
 w_2 &= |w([a]) m([b]) - w([a]) w([b]) / 2|, \\
 w_3 &= |w([a]) m([b]) + m([a]) w([b])|, \\
 w_4 &= |w([a]) m([b]) - m([a]) w([b])|, \\
 w_5 &= |w([a]) m([b]) + w([a]) w([b]) / 2|, \\
 w_6 &= |m([a]) w([b]) + w([a]) w([b]) / 2|.
 \end{aligned}$$

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι προφανής και απορρέει από το Λήμμα 3.3.1. ■

Στην συνέχεια δίνουμε ένα λήμμα το οποίο θα αποτελέσει το βασικό εργαλείο για την απόδειξη του Θεωρήματος 3.3.2.

Λήμμα 3.3.2 Έστω $[a], [b] \in \mathbb{IR}$, τότε το μέγιστο πλάτος (3.3.18) του διαστήματος $[a] \cdot [b]$ δίνεται ισοδύναμα

$$\begin{aligned}
 w([a] \cdot [b]) = \max\{ & |m([a])| w([b]) + w([a]) |m([b])|, \\
 & |m([a])| w([b]) + w([a]) w([b]) / 2, \\
 & w([a]) |m([b])| + w([a]) w([b]) / 2 \}.
 \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

Απόδειξη. Από το Πόρισμα 3.3.1 παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned}
 \max\{w_3, w_4\} = w_3 &\leq w([a]) \cdot |m([b])| + |m([a])| \cdot w([b]), \\
 \max\{w_2, w_5\} = w_5 &\leq w([a]) \cdot |m([b])| + w([a]) \cdot w([b]) / 2, \\
 \max\{w_1, w_6\} = w_6 &\leq |m([a])| \cdot w([b]) + w([a]) \cdot w([b]) / 2.
 \end{aligned}$$

και αντικαθιστώντας στην (3.3.18) παίρνουμε την αποδεικτέα (3.3.19). ■

Παρατήρηση. Ουσιαστικά, η απλοποιημένη συνάρτηση πλάτους (3.3.19) μας παρέχει το μεγαλύτερο άνω φράγμα για το πλάτος του διαστήματος $[a] \cdot [b]$.

Θεώρημα 3.3.2 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση, $[x] = [\underline{x}, \bar{x}] \in \mathbb{IR}$ και $F'([x]) = [\underline{d}, \bar{d}]$ είναι ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου της f στο $[x]$. Τότε, το διάστημα εγκλεισμού που παράγεται από τη μορφή μέσης τιμής

$$F_{MVF}([x], c) = f(c) + F'([x]) \cdot ([x] - c), \quad c \in [x]$$

έχει ελάχιστο πλάτος για όλα τα κέντρα c τα οποία περιέχονται στο διάστημα με άκρα τα βέλτιστα κέντρα c^- και c^+ .

Απόδειξη. Η συνάρτηση πλάτους που θα χρησιμοποιήσουμε προκύπτει από το Λήμμα 3.3.2 για $[a] = F'([x]) = [\underline{d}, \bar{d}]$ και $[b] = [x] - c$, δηλαδή είναι

$$\begin{aligned}
 w(F_{MVF}([x], c)) = \max\{ & |\bar{d} + \underline{d}| \cdot w([x]) / 2 + (\bar{d} - \underline{d}) \cdot |m([x]) - c|, \\
 & |\bar{d} + \underline{d}| \cdot w([x]) / 2 + (\bar{d} - \underline{d}) \cdot w([x]) / 2, \\
 & (\bar{d} - \underline{d}) \cdot |m([x]) - c| + (\bar{d} - \underline{d}) \cdot w([x]) / 2 \}.
 \end{aligned} \quad (3.3.20)$$

Θεωρώντας τώρα την (3.3.20) ως μια συνάρτηση του κέντρου c , όπου $c \in [x]$, αποσκοπούμε στο να βρούμε τους ολικούς ελαχιστοποιητές της (3.3.20). Συμβολίζουμε με

$$\varphi(c) = w(F_{MVF}([x], c)),$$

οπότε έχουμε το ακόλουθο απλό minimax πρόβλημα:

$$\begin{aligned} \min_{c \in [x]} \varphi(c), \\ \varphi(c) = \max \{ \varphi_1(c), \varphi_2(c), \varphi_3(c) \}, \end{aligned}$$

όπου οι γραμμικές συναρτήσεις φ_1 , φ_2 και φ_3 είναι

$$\begin{aligned} \varphi_1(c) &= \alpha|m - c| + \beta_1, \\ \varphi_2(c) &= \beta_2, \\ \varphi_3(c) &= \alpha|m - c| + \beta_3, \end{aligned}$$

ενώ οι σταθερές α , β_1 , β_2 και β_3 δίνονται από τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} \alpha &= \bar{d} - \underline{d}, \\ \beta_1 &= |\bar{d} + \underline{d}| \cdot \frac{w}{2}, \\ \beta_2 &= (|\bar{d} + \underline{d}| + \bar{d} - \underline{d}) \cdot \frac{w}{2}, \\ \beta_3 &= (\bar{d} - \underline{d}) \cdot \frac{w}{2} \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι $\alpha \geq 0$, $0 \leq \beta_1 \leq \beta_3 \leq \beta_2$, και $\beta_2 = \beta_1 + \beta_3$.

Σχήμα 3.3. Τα γραφήματα των φ_1 , φ_2 , και φ_3 όταν $\bar{d} + \underline{d} > 0$.

Τα γραφήματα των φ_1 , φ_2 , και φ_3 παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.3 στην περίπτωση όπου $\bar{d} + \underline{d} > 0$. Η συνάρτηση $\varphi(c)$ που θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε αναπαρίσταται από την πολυγωνική γραμμή ABCD. Η φ είναι κυρτή και τμηματικά γραμμική και παρουσιάζει την ελάχιστη τιμή της $\varphi^* = \beta_2$ για όλα τα c μεταξύ του B και του C .

Επιλύοντας την εξίσωση $\varphi_2(c) = \varphi_3(c)$, μπορεί εύκολα να επαληθευτεί ότι οι τετμημένες του B και του C είναι ίσες με τα c^- και c^+ , αντιστοίχως. Στην περίπτωση όπου $\bar{d} + \underline{d} < 0$, οι τετμημένες των B και C είναι ίσες με τα c^+ και c^- , αντίστοιχα. Τέλος, όταν $\bar{d} + \underline{d} = 0$, τότε $\beta_3 = \beta_2$ και το (μοναδικό) σημείο ολικού ελαχίστου της φ είναι το μέσο σημείο του διαστήματος. ■

Παρατήρηση. Η γενίκευση του Θεωρήματος 3.3.2 για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών είναι άμεση, αν παρατηρήσουμε ότι σε αυτή την περίπτωση, η προς ελαχιστοποίηση συνάρτηση πλάτους $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι της μορφής

$$\varphi(c) = \sum_{i=1}^n \varphi_i(c_i). \quad (3.3.21)$$

Παρατηρούμε λοιπόν ότι η συνάρτηση πλάτους (3.3.21) είναι διαχωρίσιμη, επομένως επαναλαμβάνουμε την διαδικασία της απόδειξης του Θεωρήματος 3.3.2 για κάθε μονοδιάστατη συνάρτηση $\varphi_i, i = 1, \dots, n$. Έτσι καταλήγουμε στην γενίκευση του Θεωρήματος 3.3.2 για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών.

3.3.3 Προσδιορισμός άνω και κάτω φραγμάτων βέλτιστων μορφών

Στο σημείο αυτό θα προσδιορίσουμε τα φράγματα (άνω και κάτω) των διαστημάτων εγκλεισμού που παράγονται από τις βέλτιστες μορφές μέσης τιμής. Η διαδικασία αυτή είναι απαραίτητη προκειμένου να καταλήξουμε σε ένα άλλο συμπέρασμα αναφορικά με την εξασφάλιση αυστηρών φραγμάτων (βλέπε Πρόταση 3.3.1) της $F_{MVF}([x], c^-)$ σε κλειστή μορφή. Τα ακόλουθα πορίσματα μπορούν εύκολα να προκύψουν αντικαθιστώντας τα c^- και c^+ στις σχέσεις (3.3.3) και (3.3.4).

Πόρισμα 3.3.2 Το κάτω φράγμα της βέλτιστης μορφής μέσης τιμής με κέντρο c^- είναι

$$\inf F_{MVF}([x], c^-) = \begin{cases} f(\bar{x}) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ f(\underline{x}) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ f(c^-) + w([x]) \cdot \frac{\bar{d} \cdot \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad \begin{matrix} (3.3.22a) \\ (3.3.22b) \\ (3.3.22c) \end{matrix}$$

ενώ το άνω φράγμα είναι

$$\sup F_{MVF}([x], c^-) = \begin{cases} f(\bar{x}) - w([x]) \cdot \underline{d} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, \\ f(\underline{x}) + w([x]) \cdot \bar{d} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, \\ f(c^-) + w([x]) \cdot \frac{\max(\bar{d}^2, \underline{d}^2)}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad \begin{matrix} (3.3.23a) \\ (3.3.23b) \\ (3.3.23c) \end{matrix}$$

Απόδειξη. Αρχικά θα αποδείξουμε την σχέση (3.3.22). Διακρίνουμε τις παρακάτω τρεις περιπτώσεις:

- Έστω ότι ισχύει $\bar{d} \leq 0$. Τότε από την σχέση (3.3.3a) και αντικαθιστώντας το c^- με το $\bar{x}$ (βλέπε σχέση (3.3.5a)) προκύπτει αμέσως η προς απόδειξη σχέση (3.3.22a).
- Έστω ότι ισχύει $\underline{d} \geq 0$. Τότε από την σχέση (3.3.3b) και αντικαθιστώντας το c^- με το $\underline{x}$ (βλέπε σχέση (3.3.5b)) προκύπτει αμέσως η προς απόδειξη σχέση (3.3.22b).

c) Έστω ότι ισχύει $\underline{d} < 0 < \bar{d}$. Τότε από την σχέση (3.3.3c) και αντικαθιστώντας το c^- με τη σχέση (3.3.5c) έχουμε: $\inf F_{MVF}([x], c^-) =$

$$\begin{aligned}
&= f(c^-) + \min \left\{ \underline{d} \cdot (\bar{x} - c^-), \bar{d} \cdot (\underline{x} - c^-) \right\} \\
&= f(c^-) + \min \left\{ \underline{d} \cdot \left(\bar{x} - \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} + \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(\underline{x} - \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} + \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + \min \left\{ \underline{d} \cdot \left(\frac{2\bar{x}}{2} - \frac{\bar{x}}{2} - \frac{\underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(\frac{2\underline{x}}{2} - \frac{\bar{x}}{2} - \frac{\underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + \min \left\{ \underline{d} \cdot \left(r([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(-r([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + \min \left\{ r([x]) \cdot \left(\underline{d} + \underline{d} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), r([x]) \cdot \left(-\bar{d} + \bar{d} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \min \left\{ \frac{\underline{d} \cdot (\bar{d} - \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}} + \frac{\underline{d} \cdot (\bar{d} + \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{-\bar{d} \cdot (\bar{d} + \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}} + \frac{\bar{d} \cdot (\bar{d} + \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \min \left\{ \frac{\underline{d} \cdot \bar{d} - \underline{d}^2 + \underline{d} \cdot \bar{d} + \underline{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{-\bar{d}^2 + \bar{d} \cdot \underline{d} + \bar{d}^2 + \bar{d} \cdot \underline{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \min \left\{ \frac{2 \cdot \underline{d} \cdot \bar{d}}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{2 \cdot \underline{d} \cdot \bar{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + 2 \cdot r([x]) \cdot \min \left\{ \frac{\underline{d} \cdot \bar{d}}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{\underline{d} \cdot \bar{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + w([x]) \frac{\underline{d} \cdot \bar{d}}{\bar{d} - \underline{d}}
\end{aligned}$$

Έτσι, η σχέση (3.3.22) έχει αποδειχθεί.

Στη συνέχεια θα αποδείξουμε την σχέση (3.3.23). Διακρίνουμε ομοίως τις ακόλουθες τρεις περιπτώσεις:

- a) Έστω ότι ισχύει $\bar{d} \leq 0$. Τότε από την σχέση (3.3.4a) και αντικαθιστώντας το c^- με το $\bar{x}$ (βλέπε σχέση (3.3.5a)) η προς απόδειξη σχέση (3.3.23a) προκύπτει αμέσως ως εξής: $\sup F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \underline{d} \cdot (\underline{x} - c^-) = f(\bar{x}) + \underline{d} \cdot (\underline{x} - \bar{x}) = f(\bar{x}) - w([x]) \cdot \underline{d}$.
- b) Έστω ότι ισχύει $\underline{d} \geq 0$. Τότε από την σχέση (3.3.4b) και αντικαθιστώντας το c^- με το $\underline{x}$ (βλέπε σχέση (3.3.5b)) η προς απόδειξη σχέση (3.3.23b) γίνεται: $\sup F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \bar{d} \cdot (\bar{x} - c^-) = f(\underline{x}) + \bar{d} \cdot (\bar{x} - \underline{x}) = f(\bar{x}) + w([x]) \cdot \bar{d}$.
- c) Έστω ότι ισχύει $\underline{d} < 0 < \bar{d}$. Τότε από την σχέση (3.3.4c) και αντικαθιστώντας το c^- με τη σχέση (3.3.5c) έχουμε: $\sup F_{MVF}([x], c^-) =$

$$\begin{aligned}
&= f(c^-) + \max \left\{ \underline{d} \cdot (\underline{x} - c^-), \bar{d} \cdot (\bar{x} - c^-) \right\} \\
&= f(c^-) + \max \left\{ \underline{d} \cdot \left(\underline{x} - \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(\bar{x} - \frac{\bar{x} + \underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + \max \left\{ \underline{d} \cdot \left(\frac{2\underline{x} - \bar{x} - \underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(\frac{2\bar{x} - \bar{x} - \underline{x}}{2} + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= f(c^-) + \max \left\{ \underline{d} \cdot \left(-r([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right), \bar{d} \cdot \left(r([x]) + r([x]) \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right) \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \max \left\{ -\underline{d} + \underline{d} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}}, \bar{d} + \bar{d} \cdot \frac{\bar{d} + \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \max \left\{ \frac{-\underline{d} \cdot (\bar{d} - \underline{d}) + \underline{d} \cdot (\bar{d} + \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{\bar{d} \cdot (\bar{d} - \underline{d}) + \bar{d} \cdot (\bar{d} + \underline{d})}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \max \left\{ \frac{-\underline{d}\bar{d} + \underline{d}^2 + \underline{d}\bar{d} + \underline{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{\bar{d}^2 - \bar{d}\underline{d} + \bar{d}^2 + \bar{d}\underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + r([x]) \cdot \max \left\{ \frac{2\underline{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{2\bar{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + 2r([x]) \cdot \max \left\{ \frac{\underline{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}}, \frac{\bar{d}^2}{\bar{d} - \underline{d}} \right\} \\
&= f(c^-) + w([x]) \cdot \frac{\max \{ \underline{d}^2, \bar{d}^2 \}}{\bar{d} - \underline{d}}
\end{aligned}$$

Έτσι, η σχέση (3.3.23) έχει αποδειχθεί. ■

Πόρισμα 3.3.3 Το κάτω φράγμα της βέλτιστης μορφής μέσης τιμής με κέντρο c^+ είναι

$$\inf F_{MVF}([x], c^+) = \begin{cases} f(\underline{x}) + w([x]) \cdot \underline{d} & \text{αν } \bar{d} \leq 0, & (3.3.24a) \\ f(\bar{x}) - w([x]) \cdot \bar{d} & \text{αν } \underline{d} \geq 0, & (3.3.24b) \\ f(c^+) + w([x]) \cdot \frac{\min(\bar{d}^2, \underline{d}^2)}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά} & (3.3.24c) \end{cases}$$

ενώ το άνω φράγμα είναι

$$\sup F_{MVF}([x], c^+) = \begin{cases} f(\underline{x}) & \text{αν } \bar{d} \leq 0, & (3.3.25a) \\ f(\bar{x}) & \text{αν } \underline{d} \geq 0, & (3.3.25b) \\ f(c^+) - w([x]) \cdot \frac{\bar{d} \cdot \underline{d}}{\bar{d} - \underline{d}} & \text{διαφορετικά.} & (3.3.25c) \end{cases}$$

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι παρόμοια με του Πορίσματος 3.3.2 και παραλείπεται. ■

Παρατηρούμε ότι, εάν ισχύει $\bar{d} \leq 0$ είτε $\underline{d} \geq 0$ η συνάρτηση f είναι μονότονη στο διάστημα $[x]$ και το $\inf F_{MVF}([x], c^-)$ είναι το ακριβές κάτω φράγμα της συνάρτησης στο διάστημα $[x]$, όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε από τις σχέσεις (3.3.22a) και (3.3.22b). Ομοίως σε αυτή την περίπτωση, το άνω φράγμα $\sup F_{MVF}([x], c^+)$ είναι ακριβές όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε από τις σχέσεις (3.3.25a) και (3.3.25b).

Αντιθέτως, όταν το μέσο σημείο $m([x])$ χρησιμοποιείται ως κέντρο της μορφής της μέσης τιμής, τότε είναι εύκολο να επαληθευτεί από τις σχέσεις (3.3.3a) και (3.3.3b) ότι είναι αδύνατο να ληφθούν ακριβή φράγματα για το πεδίο τιμών ακόμα και σε αυτή την απλή περίπτωση όπου η συνάρτηση είναι μονότονη σε ένα υποδιάστημα.

Συνοψίζοντας μπορούμε να πούμε ότι οι βέλτιστες μορφές μπορούν να επιστρέψουν ακριβή φράγματα εγκλεισμού για το πεδίο τιμών της συνάρτησης στη περίπτωση όπου η

συνάρτηση είναι εγγυημένα μονότονη. Αυτό μπορεί να γίνει αν χρησιμοποιήσουμε την βέλτιστη δικεντρική μορφή, η οποία είναι επίσης μια συνάρτηση εγκλεισμού της f :

$$F_{BF}([x], c^-, c^+) = F_{MVF}([x], c^-) \cap F_{MVF}([x], c^+). \quad (3.3.26)$$

Όταν τα φράγματα της παραγώγου εγγυώνται ότι η f είναι μονότονη, η βέλτιστη δικεντρική μορφή επιστρέφει το πεδίο τιμών της συνάρτησης χωρίς υπερεκτίμηση. Σε αυτή την περίπτωση, τα αντίστοιχα φράγματα δίνονται από τις σχέσεις (3.3.22) και (3.3.25).

Στη περίπτωση τώρα όπου δεν μπορούμε να αποφανθούμε μονοτονία για τη συνάρτηση, η βέλτιστη δικεντρική μορφή (3.3.26) μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό ενός καλύτερου διαστήματος εγκλεισμού για το πεδίο τιμών της συνάρτησης. Ωστόσο, το υπολογιστικό κόστος για αυτή την βελτίωση είναι ένας επιπλέον συναρτησιακός υπολογισμός στο βέλτιστο κέντρο c^+ .

Η ακόλουθη πρόταση αποτελεί γενίκευση του Πορίσματος 3.3.2. Μας παρέχει σε κλειστή μορφή τα φράγματα της βέλτιστης μορφής αναφορικά με το βέλτιστο κέντρο c^- και μας επιτρέπει να συμπεράνουμε ότι δεν είναι απαραίτητο το πλάτος του διαστήματος $[x]$ να τείνει στο μηδέν προκειμένου να έχουμε ένα ακριβές κάτω φράγμα.

Πρόταση 3.3.1 *Τα άνω και κάτω φράγματα της μορφής μέσης τιμής με κέντρο c^- δίνονται από τις ακόλουθες σχέσεις*

$$\inf F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \underline{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \bar{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ (-1) \cdot r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.27a)$$

$$\inf F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \bar{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \underline{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ (-1) \cdot r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.27b)$$

$$\inf F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \bar{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \underline{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ (-1) \cdot r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.3.27c)$$

και

$$\sup F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.28a)$$

$$\sup F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.28b)$$

$$\sup F_{MVF}([x], c^-) = f(c^-) + \begin{cases} \underline{d} (\underline{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ \bar{d} (\bar{x} - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.28c)$$

Απόδειξη. Για την απόδειξη των σχέσεων (3.3.27) και (3.3.28) θα χρησιμοποιήσουμε το ίδιο τέχνασμα που ακολουθήσαμε για την απόδειξη του Θεωρήματος 3.3.2. Επειδή η απόδειξη περιλαμβάνει πολλές πράξεις λόγω των πολλών περιπτώσεων, θα περιγράψουμε μόνο τα βασικά βήματα. Αρχικά, πρέπει να γράψουμε το διάστημα $F_{MVF}([x], c^-)$ συναρτήσει της ακτίνας και του κέντρου του. Έτσι, ξεκινώντας από το Πόρισμα 3.3.2 και χρησιμοποιώντας στα ενδιάμεσα βήματα τον ορισμό του βέλτιστου κέντρου c^- μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι η ακτίνα του $F_{MVF}([x], c^-)$ δίνεται από τη σχέση

$$r(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} r([x]) \cdot (-\underline{d}) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ r([x]) \cdot \bar{d} & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.29a)$$

$$r(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} r([x]) \cdot (-\underline{d}) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ r([x]) \cdot \bar{d} & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.29b)$$

$$r(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} r([x]) \cdot (-\underline{d}) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ r([x]) \cdot \bar{d} & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ r([x]) \cdot r(F'([x])) & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (3.3.29c)$$

ενώ το μέσο από την ακόλουθη σχέση

$$m(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} f(c^-) + \underline{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ f(c^-) + \bar{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ f(c^-) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.30a)$$

$$m(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} f(c^-) + \underline{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ f(c^-) + \bar{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ f(c^-) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.30b)$$

$$m(F_{MVF}([x], c^-)) = \begin{cases} f(c^-) + \underline{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} < 0, \\ f(c^-) + \bar{d} \cdot (m([x]) - c^-) & \text{αν } \bar{d} + \underline{d} > 0, \\ f(c^-) & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (3.3.30c)$$

Επομένως, εφόσον είναι γνωστό το κέντρο και η ακτίνα του $F_{MVF}([x], c^-)$ μπορούμε να το γράψουμε συναρτήσει των άκρων του. Έτσι αποδεικνύονται οι σχέσεις (3.3.27) και (3.3.28). ■

Παρατηρούμε ότι οι σχέσεις (3.3.27) και (3.3.28) της Πρότασης 3.3.1 προσδιορίζουν το κάτω και άνω φράγμα της f με ένα πιο γενικό τρόπο σε σχέση με τις σχέσεις (3.3.22) και (3.3.23). Όταν ισχύει $\bar{d} \leq 0$ ή $\underline{d} \geq 0$, οι σχέσεις (3.3.27) και (3.3.28) ανάγονται στις σχέσεις (3.3.22) και (3.3.23), αντιστοίχως. Μετά από μια πιο λεπτομερή μελέτη, είναι προφανές ότι όταν ισχύει κάποια από τις σχέσεις (3.3.27b) ή (3.3.27a), η υποεκτίμηση της f αναφορικά με το $f(c^-)$ είναι ίδια, αν λάβουμε υπόψη τον ορισμό του βέλτιστου κέντρου c^- .

Γενικά, η έκφραση (3.3.27) φανερώνει ότι δεν είναι απαραίτητο το πλάτος $w([x])$ του διαστήματος $[x]$ να τείνει στο μηδέν, ώστε να προσδιορίζεται ένα ακριβές κάτω φράγμα από την βέλτιστη μορφή. Ας εξετάσουμε τι συμβαίνει στην απλή περίπτωση μιας τετραγωνικής συνάρτησης.

Λήμμα 3.3.3 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια τετραγωνική συνάρτηση της μορφής $f(x) = ax^2 + bx + c$, $[x] = [\underline{x}, \bar{x}] \in \mathcal{D}$ και $0 \in F'([x])$. Τότε

$$\min_{x \in [x]} f(x) = f(c^-).$$

Απόδειξη. Η παραβολή $ax^2 + bx + c$ παρουσιάζει ελάχιστο στο σημείο $x^* = -b/2a$. Αφού, $F'([x]) = 2a[x] + b$, εφαρμόζοντας την σχέση (3.3.5) είναι εύκολο να επαληθευτεί ότι $c^- = -b/2a$ και επομένως $f(c^-) = f(x^*)$. ■

Το Λήμμα 3.3.3 δηλώνει ότι για μια τετραγωνική συνάρτηση f το βέλτιστο κέντρο c^- συμπίπτει με τον ελαχιστοποιητή x^* της f . Ωστόσο, από την έκφραση (3.3.27) βλέπουμε ότι το κάτω φράγμα του πεδίου τιμών της f υποεκτιμείται σημαντικά, μολονότι γνωρίζουμε την τιμή του ολικού ελαχίστου $f^* = f(c^-)$.

Για να εξαλειφθεί η υποεκτίμηση, υποδιαιρούμε το διάστημα $[x]$ στο βέλτιστο κέντρο c^- . Τότε η τετραγωνική συνάρτηση f γίνεται μονότονη και στα δυο υποδιαστήματα. Επομένως, λόγω της Πρότασης 3.3.1, εξασφαλίζονται ακριβή κάτω φράγματα και στα δυο υποδιαστήματα.

Η παραπάνω παρατήρηση μας οδήγησε στην υιοθέτηση μιας νέας στρατηγικής υποδιαίρεσης που χρησιμοποιεί το βέλτιστο κέντρο c^- ως σημείο υποδιαίρεσης, αντί του μέσου $m([x])$ του διαστήματος που χρησιμοποιεί η μέθοδος της διχοτόμησης. Περισσότερες λεπτομέρειες θα δούμε στο Κεφάλαιο 4 όπου θα αναπτύξουμε μια νέα μέθοδο διακλάδωσης και αποκοπής για ολική ελαχιστοποίηση.

3.4 Σύγκριση βέλτιστης μορφής μέσης τιμής με τη φυσική επέκταση

Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε με το πρόβλημα της επιλογής μιας συνάρτησης εγκλεισμού, η οποία θα δίνει το καλύτερο κάτω φράγμα για το πεδίο τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης f . Ας σημειωθεί ότι, το πρόβλημα αυτό είναι καίριο σε ότι αφορά αλγορίθμους ολικής ελαχιστοποίησης [TC02].

Σε αλγορίθμους ολικής ελαχιστοποίησης μπορούμε να έχουμε δυο επιλογές: τη φυσική επέκταση $F([x])$ της f ή τη μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c)$ όταν ένα διάστημα εγκλεισμού της f' είναι διαθέσιμο. Τα Θεωρήματα 3.3.1 και 3.3.2 δείχνουν ότι η βέλτιστη μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c^-)$ είναι η καλύτερη επιλογή ανάμεσα σε όλες τις μονοκεντρικές μορφές μέσης τιμής. Ωστόσο, υπάρχουν και σύνθετες μορφές μέσης τιμής με περισσότερα από ένα κέντρα, όπως η γραμμική συνοριακή μορφή (linear boundary value form) [Neu90, σελ. 60] και η συνάρτηση εγκλεισμού «kite» [VLC]. Ωστόσο, το βασικό τους μειονέκτημα είναι ότι κοστίζουν περισσότερες συναρτησιακές τιμές (όσα και τα κέντρα που χρησιμοποιούν).

Η Πρόταση 3.4.1 μας παρέχει ένα υπολογιστικό κριτήριο επιλογής μεταξύ της βέλτιστης μορφής μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c^-)$ και της φυσικής επέκτασης $F([x])$. Έτσι, σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου μπορούμε να αποφανθούμε ποια συνάρτηση εγκλεισμού είναι η καταλληλότερη για τον υπολογισμό ενός κάτω φράγματος της αντικειμενικής συνάρτησης f σε ένα δοθέν διάστημα $[x]$.

Πρόταση 3.4.1 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $[x] = [\underline{x}, \bar{x}] \in \mathcal{D}$ και $0 \in F'([x]) = [\underline{d}, \bar{d}]$ ένα διάστημα εγκλεισμού της f στο $[x]$. Θεωρούμε ότι είναι γνωστό το διάστημα εγκλεισμού που παράγεται από την φυσική επέκταση F , τότε

$$\text{αν } w(F([x])) \leq \lambda \cdot w([x]) \text{ έπεται ότι } \inf F_{MVF}([x], c^-) \leq \inf F([x]),$$

όπου $\lambda = -(\bar{d} \cdot \underline{d})/(\bar{d} - \underline{d})$ μη αρνητική σταθερά.

Απόδειξη. Από την υπόθεση έχουμε $w(F([x])) \leq \lambda \cdot w([x])$, άρα

$$\sup F([x]) \leq \inf F([x]) + \lambda \cdot w([x]).$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι

$$\inf F([x]) \leq f(c^-) \leq \sup F([x])$$

και χρησιμοποιώντας την σχέση (3.3.22) από το Πόρισμα 3.3.2, συμπεραίνουμε ότι

$$\inf F_{MVF}([x], c^-) \leq \inf F([x]).$$

■

Είναι προφανές ότι η σταθερά λ εξαρτάται από τα φράγματα της $F'([x])$. Τα φράγματα $\underline{d}$ και $\bar{d}$ υπολογίζονται αυτόματα με χρήση αυτόματης διαφόρισης. Ο αυτόματος υπολογισμός της $F'([x])$ απαιτεί τον υπολογισμό της $F([x])$, ο οποίος εκτελείται με απευθείας διαστηματικό υπολογισμό της συνάρτησης εγκλεισμού F .

Στις διαστηματικές μεθόδους ελαχιστοποίησης τα φράγματα των παραγώγων χρησιμοποιούνται κυρίως στο κριτήριο της μονοτονίας. Ωστόσο, αν το κριτήριο της μονοτονίας είναι ατελέσφορο τότε είναι απαραίτητος ο υπολογισμός ενός κάτω φράγματος για το πεδίο τιμών της συνάρτησης f . Η Πρόταση 3.4.1 εξασφαλίζει ότι όταν η υπόθεση είναι αληθής, η βέλτιστη μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c^-)$ δεν δίνει καλύτερο κάτω φράγμα από τη φυσική επέκταση $F(X)$ και ως εκ τούτου, ένας επιπλέον, ουσιαστικά ανώφελος, συναρτησιακός υπολογισμός στο βέλτιστο κέντρο c^- αποφεύγεται.

Αντιθέτως, όταν η υπόθεση είναι ψευδής, δηλαδή αν $w(F([x])) > \lambda \cdot w([x])$, η επιλογή της καταλληλότερης συνάρτησης εγκλεισμού παραμένει ανοιχτό θέμα. Εύκολα μπορεί να αποδειχθεί ότι όταν ισχύει

$$f(c^-) > \inf F([x]) + \lambda \cdot w([x])$$

τότε

$$\inf F([x]) < \inf F_{MVF}([x], c^-).$$

Δυστυχώς, ο έλεγχος αυτής της συνθήκης προϋποθέτει έναν επιπλέον συναρτησιακό υπολογισμό στο κέντρο c^- . Έτσι, ο μόνος τρόπος για την επίτευξη του καλύτερου κάτω φράγματος είναι ο υπολογισμός της τομής της $F([x])$ με την $F_{MVF}([x], c^-)$.

3.5 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, ασχοληθήκαμε με τον προσδιορισμό των βέλτιστων κέντρων στις μορφές μέσης τιμής. Το Θεώρημα 3.3.1 μας παρέχει τα βέλτιστα κέντρα c^- και c^+ σε συμμετρικές κλειστές μορφές. Επίσης, αποδεικνύουμε ότι, όταν η μορφή της μέσης τιμής εφοδιαστεί με τα παραγόμενα βέλτιστα κέντρα, παράγονται βέλτιστες μορφές αναφορικά με κάτω ή το άνω φράγμα, αντίστοιχα. Στη συνέχεια, αποδείξαμε αυστηρά την εικασία του Baumann, Θεώρημα 3.3.2, η οποία αφορούσε το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού που παράγεται από τη μορφή μέσης τιμής. Συγκεκριμένα, αποδείξαμε ότι το πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού γίνεται ελάχιστο όταν χρησιμοποιήσουμε ως κέντρο οποιοδήποτε σημείο εντός του κλειστού διαστήματος που ορίζεται με άκρα τα βέλτιστα κέντρα.

Επίσης, στην Ενότητα 3.3.3, προσδιορίσαμε τα άνω και κάτω φράγματα των βέλτιστων μορφών, με κλειστές αναλυτικές μορφές (Πόρισμα 3.3.2 και 3.3.3). Επιπλέον, η Πρόταση 3.3.1 αποτελεί μία γενίκευση του Πορίσματος 3.3.2 και μας υποδεικνύει ότι δεν είναι απαραίτητο το πλάτος του διαστήματος $[x]$ να τείνει στο μηδέν, προκειμένου να έχουμε ένα ακριβές κάτω φράγμα για το πεδίο τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης f εντός του $[x]$.

Η Πρόταση 3.3.1, σε συνδυασμό με το Λήμμα 3.3.3, μας υποδεικνύει μία νέα στρατηγική υποδιαίρεσης για διαστηματικές μεθόδους ολικής ελαχιστοποίησης.

Τέλος, προτείνουμε ένα υπολογιστικό κοιτήριο (Πρόταση 3.4.1) για την επιλογή της κατάλληλης συνάρτησης εγκλεισμού, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε ένα συγκεκριμένο βήμα ενός διαστηματικού αλγορίθμου που χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία.

3.6 Θέματα υπό μελέτη

Σε αυτή την ενότητα θα αναφέρουμε περιληπτικά μερικά σημαντικά αδημοσίευτα ακόμη αποτελέσματα που προέκυψαν κατά την διάρκεια της ενασχόλησής μας με τις βέλτιστες μορφές μέσης τιμής και τα βέλτιστα κέντρα.

Εντοπισμός κυρτότητας με χρήση πρώτης τάξης πληροφορία. Βασιζόμενοι στο Θεώρημα 3.3.1 μπορούμε να εξάγουμε σημαντικά αποτελέσματα αναφορικά με τον εντοπισμό περιοχών όπου η αντικειμενική συνάρτηση είναι κυρτή ή κοίλη. Πρέπει να σημειωθεί ότι μέχρι σήμερα ο εντοπισμός της κυρτότητας στις διαστηματικές μεθόδους επιτυγχάνεται με χρήση ολικής πληροφορίας δεύτερης παραγώγου (βλέπε ενότητα 2.6.4, σελ. 36). Στην υπό

μελέτη εργασία χρησιμοποιούμε μόνο πρώτης τάξης παράγωγο για να παράγουμε ικανές και αναγκαίες συνθήκες έτσι ώστε να διασφαλίσουμε ότι η συνάρτηση είναι κυρτή ή κοίλη σε ένα διάστημα.

Σύγκλιση των βέλτιστων κέντρων σε ολικά βέλτιστες λύσεις. Στο Λήμμα 3.3.3 δείξαμε ότι στην περίπτωση όπου η συνάρτηση είναι τετραγωνική το βέλτιστο κέντρο c^- ταυτίζεται με τον ολικό ελαχιστοποιητή x^* της f . Επιπλέον, σε μη τετραγωνικές συναρτήσεις μπορούμε να δείξουμε ότι η ακολουθία των σημείων, που ορίζεται από τα βέλτιστα κέντρα c^- , συγκλίνει στο ολικό ελάχιστο υπό την προϋπόθεση ότι ο Αλγόριθμος 2.1 χρησιμοποιεί best-first στρατηγική για την επιλογή του επόμενου διαστήματος.

Κεφάλαιο 4

Νέα μέθοδος διακλάδωσης & αποκοπής

Στο κεφάλαιο αυτό θα περιγράψουμε μια νέα μέθοδο διακλάδωσης και φραξίματος για ολική βελτιστοποίηση, η οποία βασίζεται στην ύπαρξη των βέλτιστων κέντρων στις μορφές μέσης τιμής. Τα βέλτιστα κέντρα και συγκεκριμένα το c^- , χρησιμοποιείται σε τρεις διαδικασίες του αλγορίθμου. Πρώτον, για τον υπολογισμό κάτω φραγμάτων μέσω της μορφής μέσης τιμής, δεύτερον για την επίτευξη γραμμικών βημάτων αποκοπής και τρίτον για την επίτευξη διακλάδωσης στον αλγόριθμο. Ο αλγόριθμος που θα παρουσιάσουμε, συγκρινόμενος με τους πρόσφατους αλγορίθμους, έχει αποτιμηθεί ως ο πιο αποδοτικός και αξιόπιστος αλγόριθμος που έχει προταθεί μέχρι αυτή τη στιγμή, στη διεθνή βιβλιογραφία. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο έχουν καταγραφεί στις εργασίες [SG01], [SG02] και [SG05].

4.1 Εισαγωγή

Οι διαστηματικές μέθοδοι διακλάδωσης και φραξίματος για ολική βελτιστοποίηση παρέχουν εγγυημένες και αξιόπιστες λύσεις για προβλήματα ολικής βελτιστοποίησης της μορφής

$$\min_{x \in [x]} f(x),$$

όπου $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 διαφορίσιμη συνάρτηση, $\mathcal{D}$ είναι η κλειστή θήκη ενός μη κενού φραγμένου ανοιχτού υποσυνόλου του $\mathbb{R}$ και το $[x] \subseteq \mathcal{D}$ είναι το διάστημα αναζήτησης όπου είναι περιορισμένη η μεταβλητή x . Στόχος μας είναι να βρούμε το ολικό ελάχιστο f^* καθώς και το σύνολο $\mathcal{X}^* = \{x^* \in [x] : f(x^*) = f^*\}$ όλων των ολικών ελαχιστοποιητών της f . Εφόσον, το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της $f(x)$ είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα μεγιστοποίησης της $-f(x)$, ο παραπάνω ορισμός εμπεριέχει και την αναζήτηση για ολικούς μεγιστοποιητές. Αυτές οι μέθοδοι υποδιαίρουν το διάστημα αναζήτησης σε υποδιαστήματα και χρησιμοποιούν φράγματα για την αντικειμενική συνάρτηση, ώστε να αποκλείουν υποδιαστήματα όπου δεν βρίσκεται ένας ολικός ελαχιστοποιητής.

Η διαστηματική αριθμητική [Mo066, AH83] μπορεί να παρέχει εγγυημένα φράγ-

ματα για το πεδίο τιμών $f([x])$ της f στο $[x]$. Ωστόσο, η εύρεση αυστηρότερων φραγμάτων για το πεδίο τιμών, με σχετικά μικρό υπολογιστικό κόστος, αποτελεί μείζον πρόβλημα στους διαστηματικούς αλγορίθμους. Όταν η αντικειμενική συνάρτηση $f \in C^1$, τότε είναι διαθέσιμο ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου, οπότε, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μορφή της μέσης τιμής για τη βελτίωση του εγκλεισμού του πεδίου τιμών της συνάρτησης [Mo06b, CM80, RR88]. Επιπλέον, τα φράγματα των παραγώγων μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον έλεγχο της μονοτονίας της συνάρτησης ώστε να απορριφθούν υποπεριοχές όπου η συνάρτηση είναι αυστηρώς μονότονη [Han92, Kea96].

Στο κεφάλαιο αυτό, θα προτείνουμε έναν αλγόριθμο διακλάδωσης και αποκοπής (branch-and-prune) ο οποίος βασίζεται στους αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος (branch-and-bound). Οι μέθοδοι διακλάδωσης και αποκοπής εφαρμόζουν διαδοχική ανάλυση σε μικρότερα ξένα μεταξύ τους υποπροβλήματα, τα οποία επιλύονται αναδρομικά μέχρι την ικανοποίηση ενός κριτηρίου τερματισμού και την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Η διακλάδωση επιτυγχάνεται είτε με υποδιαίρεση ή έμμεσα με αποκοπή της περιοχής αναζήτησης. Στην εργασία των Hansen et al [HJX94] περιγράφεται ένας αλγόριθμος ο οποίος χρησιμοποιεί μεγαλύτερης τάξης παραγώγους για τον υπολογισμό των *κλίσεων χορδής* (cord-slopes), όπως αποκαλούνται, οι οποίες χρησιμοποιούνται από διάφορα κριτήρια για την απαλοιφή τμημάτων της περιοχής αναζήτησης, υπό την προϋπόθεση ότι η αντικειμενική συνάρτηση έχει μόνο πεπερασμένου πλήθους τοπικά ελάχιστα. Αντιθέτως, οι τεχνικές αποκοπής που χρησιμοποιούν μόνο πρώτης τάξης πληροφορία με την χρήση διαστηματικής παραγώγου, δίνονται στις εργασίες [SG01, SG02, CMGS03, VLC]. Για μη διαφορίσιμες συναρτήσεις μπορεί να εφαρμοστεί μια τεχνική αποκοπής, η οποία προτάθηκε από τον Ratz [Rat99] και βασίζεται σε διαστηματικές κλίσεις [KN85].

Στην εργασία των Sotiropoulos και Grapsa παρουσιάζεται ένας αλγόριθμος διακλάδωσης και αποκοπής ο οποίος χρησιμοποιεί πληροφορία πρώτης τάξης. Η πληροφορία πρώτης τάξης παρέχεται από τον υπολογισμό διαστηματικών παραγώγων. Ο αλγόριθμος βασίζεται στην ύπαρξη των βέλτιστων κέντρων, στις μορφές μέσης τιμής. Τα βέλτιστα κέντρα προσδιορίζονται άμεσα από κλειστές μορφές, όταν είναι διαθέσιμο ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου. Επιπλέον, τα βέλτιστα κέντρα χρησιμοποιούνται για την ανάπτυξη μιας νέας διαδικασίας επιτάχυνσης για διαστηματικούς αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος. Ο αλγόριθμος που προκύπτει καλείται διαστηματικός αλγόριθμος διακλάδωσης και αποκοπής, αφού η αναπτυσσόμενη διαδικασία επιτάχυνσης αποσκοπεί στην απαλοιφή περιοχών όπου δεν βρίσκεται το ολικό ελάχιστο και κατά συνέπεια, περιορίζεται αισθητά ο χώρος αναζήτησης. Συνοπτικά ο προτεινόμενος αλγόριθμος χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία προκειμένου να: (i) εφαρμόσει το κριτήριο της μονοτονίας, (ii) να υπολογίσει το βέλτιστο κέντρο που σχετίζεται με το κάτω φράγμα της αντικειμενικής συναρτήσης, (iii) να εφαρμόσει την βέλτιστη μορφή μέσης τιμής για τον υπολογισμό ενός κάτω φράγματος της συνάρτησης σε ένα δοθέν διάστημα και (iv) να αποκόψει τμήματα από το διάστημα αναζήτησης κάνοντας χρήση του τρέχοντος άνω φράγματος του ολικού ελαχίστου.

4.2 Γραμμικά βήματα αποκοπής

Κίνητρο για την ανάπτυξη των βημάτων αποκοπής, αποτέλεσε η εργασία των Hansen και Segurta [HS80], οι οποίοι προσδιόρισαν την εφικτή περιοχή για ένα πρόβλημα μη γραμμικών περιορισμών επιλύοντας ένα σύνολο από διαστηματικές γραμμικές ανισότητες. Εμπνευσμένοι από την εργασία αυτή, αναπτύξαμε μια επαναληπτική διαδικασία που αποσκοπεί στην ασφαλή αποκοπή περιοχών-τμημάτων του διαστήματος αναζήτησης όπου δεν εμφανίζεται ολικό ελάχιστο. Συγκεκριμένα, η διαδικασία αυτή αποτελείται από ένα εσωτερικό βήμα και το πολύ δυο εξωτερικά βήματα αποκοπής. Η αναπτυσσόμενη τεχνική, βασίζεται σε πληροφορία πρώτης τάξης παραγώγου και αποτελεί μια διαδικασία επιτάχυνσης στο κύριο τμήμα του αλγορίθμου.

Στην συνέχεια αναπτύσσουμε το θεωρητικό υπόβαθρο και παρουσιάζουμε τους αλγορίθμους των γραμμικών βημάτων αποκοπής (εσωτερικών και εξωτερικών). Τα εσωτερικά και εξωτερικά βήματα αποκοπής προκύπτουν από την επίλυση των γραμμικών διαστηματικών ανισοτήτων που προκύπτουν από το ανάπτυγμα Taylor πρώτης τάξεως.

Έστω ότι $\tilde{f}$ είναι ένα άνω φράγμα του ολικού ελαχίστου f^* και έστω ότι το $[y] \subseteq [x]$ είναι το τρέχον υποδιάστημα. Το άνω φράγμα $\tilde{f}$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια προσπάθεια για την αποκοπή του $[y]$, δηλαδή, να αποκόψουμε τμήματά του όπου δεν περιέχεται ολικό ελάχιστο. Στόχος μας είναι η εύρεση ενός διαστήματος εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ του συνόλου των σημείων $\tilde{y}$ τέτοιο ώστε $f(\tilde{y}) \leq \tilde{f}$. Λαμβάνοντας υπόψιν ότι $f \in C^1$, μπορούμε να αναπτύξουμε την f γύρω από ένα κέντρο $c \in [y]$, δηλαδή,

$$f(\tilde{y}) = f(c) + (\tilde{y} - c) \cdot f'(\xi),$$

όπου ξ είναι ένα σημείο μεταξύ του c και του $\tilde{y}$. Αφού το $c \in [y]$ και το $\tilde{y} \in [y]$, τότε $\xi \in [y]$. Συνεπώς,

$$f(\tilde{y}) \in f(c) + F'([y]) \cdot (\tilde{y} - c) \leq \tilde{f}.$$

Θέτοντας

$$\begin{aligned} z &= \tilde{y} - c, \\ f_c &= f(c), \\ [d] &= [\underline{d}, \overline{d}] = F'([y]) \end{aligned}$$

η παραπάνω διαστηματική ανισότητα γράφεται

$$(f_c - \tilde{f}) + [d] \cdot z \leq 0. \quad (4.2.1)$$

Το σύνολο λύσης $[z]$ της ανίσωσης (4.2.1) δίνεται σε κάθε περίπτωση ως ακολούθως ([HS80,

$$[z] = \begin{cases} [-\infty, (\tilde{f} - f_c)/\bar{d}] \cup \\ [(\tilde{f} - f_c)/\underline{d}, +\infty], & \text{αν } \tilde{f} < f_c, \underline{d} < 0 < \bar{d}, & (4.2.2a) \\ [-\infty, (\tilde{f} - f_c)/\bar{d}], & \text{αν } \tilde{f} < f_c, \underline{d} \geq 0 \text{ και } \bar{d} > 0, & (4.2.2b) \\ [(\tilde{f} - f_c)/\underline{d}, +\infty], & \text{αν } \tilde{f} < f_c, \underline{d} < 0 \text{ και } \bar{d} \leq 0, & (4.2.2c) \\ \emptyset, & \text{αν } \tilde{f} < f_c, \underline{d} = \bar{d} = 0, & (4.2.2d) \\ [-\infty, +\infty], & \text{αν } \tilde{f} \geq f_c, \underline{d} \leq 0 \leq \bar{d}, & (4.2.2e) \\ [-\infty, (\tilde{f} - f_c)/\underline{d}], & \text{αν } \tilde{f} \geq f_c, \underline{d} > 0, & (4.2.2f) \\ [(\tilde{f} - f_c)/\bar{d}, +\infty], & \text{αν } \tilde{f} \geq f_c, \bar{d} < 0. & (4.2.2g) \end{cases}$$

Επομένως,

$$[\tilde{y}] = c + [z]$$

είναι το σύνολο των σημείων $\tilde{y} \in [y]$ που ικανοποιούν την ανισότητα (4.2.1). Εφόσον, μας ενδιαφέρουν μόνο οι λύσεις εντός του διαστήματος $[y]$ (αρκεί δηλαδή να υπολογίσουμε τα σημεία $\tilde{y} \in [y]$), υπολογίζουμε το διάστημα εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ ως εξής:

$$[\tilde{y}] = (c + [z]) \cap [y]. \quad (4.2.3)$$

Πρέπει να παρατηρήσουμε ότι, τις τελευταίες δυο περιπτώσεις του συνόλου λύσεων (4.2.2) δεν τις εξετάζουμε, διότι η συνάρτηση είναι αυστηρά μονότονη σε ολόκληρο το υποδιάστημα κι επομένως αυτό δεν μπορεί να περιέχει σπάσιμα σημεία στο εσωτερικό του. Επομένως, ασχολούμαστε με τις υπόλοιπες πέντε πρώτες περιπτώσεις (4.2.2a)–(4.2.2e):

Αν η λύση $[z]$ της ανίσωσης (4.2.1) δίνεται ως ένωση δύο διαστημάτων, $[z_1]$ και $[z_2]$ (περίπτωση (4.2.2a)), τότε το διάστημα εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ παράγεται από τα διαστήματα

$$[\tilde{y}_i] = (c + [z_i]) \cap [y], \quad i = 1, 2.$$

Στις υπόλοιπες περιπτώσεις, όπου η λύση $[z]$ είναι ένα διάστημα, η επιθυμητή λύση της ανίσωσης (4.2.1) είναι και αυτή ένα διάστημα $[\tilde{y}]$ και κατά συνέπεια, το τρέχον υποδιάστημα $[y]$ αποκόπτεται είτε από δεξιά – περίπτωση (4.2.2b) – είτε από αριστερά – περίπτωση (4.2.2c).

Η περίπτωση (4.2.2d) είναι ειδική. Αυτή λαμβάνει χώρα μόνο όταν η f είναι σταθερή και $\underline{d} = \bar{d} = 0$ εντός του $[y]$. Εφόσον $\tilde{f} < f_c$, το διάστημα $[y]$ δεν περιέχει κανέναν ολικό ελαχιστοποιητή, οπότε μπορεί να απορριφθεί αμέσως.

Τέλος, παρατηρούμε ότι στην περίπτωση (4.2.2e), δεν είναι δυνατόν να επιτευχθεί ένα βήμα αποκοπής, εφόσον το σύνολο λύσεων $[\tilde{y}]$ ταυτίζεται με το διάστημα $[y]$.

4.2.1 Εσωτερικό βήμα αποκοπής

Σε αυτή την υποενότητα παρουσιάζουμε αλγοριθμικά το εσωτερικό βήμα αποκοπής. Αυτό το βήμα χρησιμοποιεί φράγματα της παραγώγου και μια επιπλέον συναρτησιακή τιμή σε ένα σημείο $c \in [y] \subseteq [x]$. Στην περίπτωση όπου $0 \in [d] = [\underline{d}, \bar{d}]$, θέτουμε

$$p = c + (\tilde{f} - f_c)/\bar{d} \quad \text{και} \quad q = c + (\tilde{f} - f_c)/\underline{d}.$$

Τότε, αν ισχύει $\tilde{f} < f_c$, η σχέση (4.2.3) σε συνδυασμό με την σχέση (4.2.2) παίρνει την ακόλουθη μορφή:

$$[\tilde{y}] = \begin{cases} [\underline{y}, p] \cup [q, \overline{y}], & \text{αν } \underline{d} < 0 < \overline{d}, \\ [\underline{y}, p], & \text{αν } \underline{d} \geq 0 \text{ και } \overline{d} > 0, \\ [q, \overline{y}], & \text{αν } \underline{d} < 0 \text{ και } \overline{d} \leq 0, \\ \emptyset, & \text{αν } \underline{d} = \overline{d} = 0. \end{cases} \quad \begin{matrix} (4.2.4a) \\ (4.2.4b) \\ (4.2.4c) \\ (4.2.4d) \end{matrix}$$

Όταν το $\tilde{f} \geq f_c$ και $\underline{d} \leq 0 \leq \overline{d}$, το διάστημα εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ συμπίπτει με το $[\underline{y}] = [\underline{y}, \overline{y}]$ και επομένως δεν είναι εφικτό ένα βήμα εσωτερικής αποκοπής (βλέπε (4.2.2e)).

Στην περίπτωση (4.2.4a), το διάστημα εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ αποτελείται από τα διαστήματα

$$[y_1] = [\underline{y}, p] \text{ και } [y_2] = [q, \overline{y}].$$

Εφόσον ισχύει $\tilde{f} - f_c < 0$, $p < c < q$, το σημείο p αναπαριστά το πιο αριστερό σημείο του τρέχοντος διαστήματος αναζήτησης, τέτοιο ώστε $\tilde{f} < f(p)$, ενώ το q είναι το πιο δεξιό σημείο του τρέχοντος διαστήματος αναζήτησης, τέτοιο ώστε $\tilde{f} < f(q)$. Επομένως το ολικό ελάχιστο δεν μπορεί να βρίσκεται στο ανοικτό διάστημα (p, q) , άρα το διάστημα μπορεί να απορριφθεί με εγγύηση (βλέπε Σχήμα 4.1).

Στην περίπτωση (4.2.4b) ή (4.2.4c), το διάστημα εγκλεισμού $[\tilde{y}]$ είναι το διάστημα $[y_1]$ ή $[y_2]$, αντίστοιχα. Επομένως τα διαστήματα

$$(p, \overline{y}] \text{ και } [\underline{y}, q)$$

μπορούν να διαγραφούν. Όταν ισχύει η περίπτωση (4.2.4d), τότε ολόκληρο το διάστημα απορρίπτεται, αφού $[\tilde{y}] = \emptyset$.

Οι ιδιότητες του διαστήματος $[\tilde{y}]$ συνοψίζονται στο ακόλουθο θεώρημα:

Θεώρημα 4.2.1 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $[y] \in \mathbb{IR}$, $c \in [y] \subseteq [x] \subseteq \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}$. Επιπλέον, έστω ότι $f_c = f(c)$, $0 \in [d] = F'([y])$ και $\tilde{f} \geq \min_{x \in [x]} f(x)$. Τότε, το διάστημα $[\tilde{y}]$ που ορίζεται από την (4.2.4) έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $[\tilde{y}] \subseteq [y]$.
2. Κάθε ολικός ελαχιστοποιητής x^* της f στο $[y]$ ικανοποιεί την συνθήκη $x^* \in [\tilde{y}]$.
3. Αν ισχύει ότι $[\tilde{y}] = \emptyset$ τότε δεν υπάρχει ολικός ελαχιστοποιητής της f στο $[y]$.

Απόδειξη. Η ιδιότητα 1 προκύπτει άμεσα από τον ορισμό του $[\tilde{y}]$ στην σχέση (4.2.4). Η απόδειξη της ιδιότητας 2 προκύπτει από την παραπάνω συζήτηση, ενώ η ιδιότητα 3 είναι συνέπεια της ιδιότητας 2. ■

Βασίζόμενοι στις περιπτώσεις (4.2.4a)-(4.2.4d), όπου ένα βήμα αποκοπής είναι πιθανό κάτω από την αναγκαία συνθήκη $\tilde{f} < f_c$, μπορούμε να διατυπώσουμε τα λεπτομερή βήματα του αλγορίθμου της εσωτερικής αποκοπής. Ο Αλγόριθμος 4.1 λαμβάνει ως είσοδο το υποδιάστημα $[y] = [\underline{y}, \overline{y}] \subseteq [x]$, $c \in [y]$, $f_c = f(c)$, το διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου $[d] = [\underline{d}, \overline{d}]$ στο $[y]$ και το τρέχον άνω φράγμα $\tilde{f}$, και επιστρέφει το αποκοπτόμενο (πιθανόν κενό) υποσύνολο $[\tilde{y}] = [y_1] \cup [y_2]$ του $[y]$.

Στο Σχήμα 4.1, απεικονίζεται το εσωτερικό βήμα αποκοπής σχεδιάζοντας δυο ευθείες από το σημείο $(c, f(c))$ και τέμνοντάς αυτές με το $\tilde{f}$. Η πρώτη ευθεία με τη μεγαλύτερη

Αλγόριθμος 4.1 Ο αλγόριθμος εσωτερικής αποκοπής.

InnerPrune($[y], c, f_c, [d], \tilde{f}, [y_1], [y_2]$)

```
1: if  $\bar{d} > 0$  then  
2:    $p := c + (\tilde{f} - f_c)/\bar{d}$ ;  
3:   if  $p \geq \underline{y}$  then  
4:      $[y_1] := [\underline{y}, p]$ ;  
5:   else  
6:      $[y_1] := \emptyset$ ;  
7:   end if  
8: end if  
9: if  $\underline{d} < 0$  then  
10:   $q := c + (\tilde{f} - f_c)/\underline{d}$ ;  
11:  if  $q \leq \bar{y}$  then  
12:     $[y_2] := [q, \bar{y}]$ ;  
13:  else  
14:     $[y_2] := \emptyset$ ;  
15:  end if  
16: end if  
17: return  $[y_1], [y_2]$ ;
```

(θετική) κλίση $\bar{d}$ της f στο $[y]$ τέμνει την $\tilde{f}$ στο σημείο p , ενώ η ευθεία με την μικρότερη κλίση $\underline{d}$ τέμνει την $\tilde{f}$ στο σημείο q . Παρατηρούμε, γεωμετρικά, ότι το εσωτερικό βήμα αποκοπής ισοδυναμεί με ένα βήμα της επεκταμένης μεθόδου Newton [Moo66, AH83, Han92] εφαρμοζόμενο στην εξίσωση $f(y) - \tilde{f} = 0$, $y \in [y]$.

Σχήμα 4.1. Γεωμετρική αναπαράσταση του εσωτερικού βήματος αποκοπής όταν $\underline{d} < 0 < \bar{d}$.

4.2.2 Εξωτερικό βήμα αποκοπής

Το βήμα εξωτερικής αποκοπής χρησιμοποιεί την γνωστή πληροφορία σε μια προσπάθεια για τον περιορισμό των φραγμάτων του τρέχοντος υποδιαστήματος $[y] \subseteq [x]$. Ας υποθέσουμε ότι οι συναρτησιακές τιμές $f(\underline{y})$ και $f(\bar{y})$ στα δυο συνοριακά σημεία είναι διαθέσιμες και ότι $0 \in [d] = F'([y])$. Αναπτύσσοντας κατά Taylor την f γύρω από τα άκρα $\underline{y}$ και $\bar{y}$,

λαμβάνουμε δυο διαστηματικές ανισότητες παρόμοιες με την (4.2.1):

$$(f(\underline{y}) - \tilde{f}) + [d] \cdot z_L \leq 0 \quad \text{και} \quad (f(\overline{y}) - \tilde{f}) + [d] \cdot z_R \leq 0, \quad (4.2.5)$$

όπου $z_L = \tilde{y}_L - \underline{y}$ και $z_R = \tilde{y}_R - \overline{y}$.

Σε μια πρόσφατη εργασία [CMGS03], οι συγγραφείς έκαναν την παρατήρηση ότι είναι εφικτό να περιορίσουμε τα άκρα του τρέχοντος διαστήματος αρκεί να είναι γνωστό μόνο ένα κάτω φράγμα για την τιμή της f στα άκρα του διαστήματος. Έτσι, μπορεί να επιτευχθεί εξωτερική αποκοπή χωρίς να απαιτούνται οι ακριβείς συναρτησιακές τιμές της f . Στη συνέχεια, εκμεταλλευόμενοι αυτή την παρατήρηση, θα περιγράψουμε τη διαδικασία του εξωτερικού βήματος αποκοπής.

Αν $\underline{f}_L$ και $\underline{f}_R$ είναι τα κάτω φράγματα της $f(\underline{y})$ και της $f(\overline{y})$, αντίστοιχα, τότε οι ανισότητες (4.2.5) είναι ισοδύναμες με τις ακόλουθες:

$$(\underline{f}_L - \tilde{f}) + [d] \cdot z_L \leq 0 \quad \text{και} \quad (\underline{f}_R - \tilde{f}) + [d] \cdot z_R \leq 0. \quad (4.2.6)$$

Σκοπός μας είναι η εύρεση του συνόλου $[\tilde{y}]$ των σημείων $\tilde{y}$ που ικανοποιούν και τις δυο ανισότητες (4.2.6) ταυτόχρονα. Έτσι, απαιτούμε

$$[\tilde{y}] = [\tilde{y}_L] \cap [\tilde{y}_R]$$

όπου, σύμφωνα με τις (4.2.2) και (4.2.3),

$$\begin{aligned} [\tilde{y}_L] &= ((\underline{y} + [z_L]) \cap [y]) \\ &= ([-\infty, \underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}] \cup [\underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}, +\infty]) \cap [\underline{y}, \overline{y}] \\ &= ([-\infty, \underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}] \cap [\underline{y}, \overline{y}]) \cup ([\underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}, +\infty] \cap [\underline{y}, \overline{y}]) \\ &= \emptyset \cup [\underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}, \overline{y}] \\ &= [\underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}, \overline{y}] \quad \text{και} \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

$$[\tilde{y}_R] = ((\overline{y} + [z_R]) \cap [y]) = [\underline{y}, \overline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_R)/\overline{d}]. \quad (4.2.8)$$

Οι ιδιότητες του διαστήματος $[\tilde{y}]$ συνοψίζονται στο ακόλουθο θεώρημα:

Θεώρημα 4.2.2 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $[y] = [\underline{y}, \overline{y}] \subseteq [x] \subseteq \mathbb{R}$ και $0 \in F'([y]) = [\underline{d}, \overline{d}]$. Έστω, επίσης, ότι $\underline{f}_L$ και $\underline{f}_R$ είναι κάτω φράγματα των $f(\underline{y})$ και $f(\overline{y})$ αντίστοιχα και $\tilde{f} \geq \min_{x \in X} f(x)$ είναι το τρέχον άνω φράγμα, τέτοιο ώστε $\tilde{f} \leq \min\{\underline{f}_L, \underline{f}_R\}$. Τότε, το διάστημα

$$[\tilde{y}] = [r, s] = [\underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L)/\underline{d}, \overline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_R)/\overline{d}] \quad (4.2.9)$$

έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $[\tilde{y}] \subseteq [y]$.
2. Κάθε ολικός ελαχιστοποιητής x^* της f στο $[y]$ ικανοποιεί την σχέση $x^* \in [\tilde{y}]$.
3. Αν $[\tilde{y}] = \emptyset$, τότε δεν υπάρχει ολικός ελαχιστοποιητής της f στο $[y]$.

Απόδειξη. Η Ιδιότητα 1 προκύπτει αμέσως από τον ορισμό του διαστήματος $[\tilde{y}]$ στην σχέση (4.2.9). Για την απόδειξη της Ιδιότητας 2, υποθέτουμε ότι υπάρχει ένα $x^* \in [\mathcal{Z}] = [y] \cap [\underline{y}, r)$

τέτοιον ώστε $f(x^*) = f^*$. Τότε, θα υπάρξει ένα $d_* \in [\underline{d}, \bar{d}]$ που ικανοποιεί την σχέση $f(x^*) = f(\underline{y}) + d_*(x^* - \underline{y})$. Έτσι,

$$\begin{aligned} f(x^*) &= f(\underline{y}) + d_* \cdot (x^* - \underline{y}) \geq f(\underline{y}) + \underline{d} \cdot (x^* - \underline{y}) \\ &> \underline{f}_L + \underline{d} \cdot (x^* - \underline{y}) > \underline{f}_L + \underline{d} \cdot (r - \underline{y}) = \underline{f}_L + (\tilde{f} - \underline{f}_L) = \tilde{f}, \end{aligned}$$

το οποίο έρχεται σε αντίθεση με την υπόθεση ότι $\tilde{f} \geq \min_{x \in [x]} f(x)$. Επομένως το $x^* \notin [Z]$. Η περίπτωση όπου ισχύει $x^* \notin [Z] = [y] \cap (s, \bar{y}]$ αποδεικνύεται με όμοιο τρόπο. Τέλος, η Ιδιότητα 3 προκύπτει από τις Ιδιότητες 1 και 2. ■

Στη συνέχεια δίνουμε τον λεπτομερή αλγόριθμο για την διαδικασία του εξωτερικού βήματος αποκοπής. Ο Αλγόριθμος 4.2 λαμβάνει ως είσοδο το υποδιάστημα $[y] = [\underline{y}, \bar{y}] \subseteq [x]$, το διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου $[d] = [\underline{d}, \bar{d}]$ στο $[y]$, το τρέχον άνω φράγμα $\tilde{f}$ και τα κάτω φράγματα $\underline{f}_L$ (αριστερά) και $\underline{f}_R$ (δεξιά) των $f(\underline{y})$, $f(\bar{y})$ αντίστοιχα και επιστρέφει ένα διάστημα $[y]$ το οποίο είναι εξωτερικά αποκομμένο.

Αλγόριθμος 4.2 Ο αλγόριθμος εξωτερικής αποκοπής.

```

OuterPrune([y],  $\underline{f}_L$ ,  $\underline{f}_R$ , [d],  $\tilde{f}$ )
1: if  $\tilde{f} < \underline{f}_R$  then { το διάστημα [y] μπορεί να αποκοπεί από τα δεξιά }
2:   if  $\bar{d} > 0$  then
3:      $s := \bar{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_R) / \bar{d}$ ;
4:     if  $s \geq \bar{y}$  then
5:        $[y] := [\underline{y}, s]$ ;
6:     else
7:        $[y] := \emptyset$ ;
8:   if  $\tilde{f} < \underline{f}_L$  then {το διάστημα [y] μπορεί να αποκοπεί από τα αριστερά }
9:     if  $\underline{d} < 0$  then
10:       $r := \underline{y} + (\tilde{f} - \underline{f}_L) / \underline{d}$ ;
11:      if  $r \leq \underline{y}$  then
12:         $[y] := [r, \bar{y}]$ ;
13:      else
14:         $[y] := \emptyset$ ;
15: return [y];

```

Στο σχήμα 4.2 παρουσιάζεται η γεωμετρική ερμηνεία του εξωτερικού βήματος αποκοπής χρησιμοποιώντας ακριβή κάτω φράγματα για τα $f(\underline{y})$ και $f(\bar{y})$. Το σημείο s καθορίζεται ως η τομή της ευθείας $h(y) = f(\bar{y}) + \bar{d} \cdot (y - \bar{y})$ με το τρέχον άνω φράγμα $\tilde{f}$ για το ολικό ελάχιστο. Παρόμοια, το σημείο r δίνεται από την τομή της ευθείας $g(y) = f(\underline{y}) + \underline{d} \cdot (y - \underline{y})$ με το $\tilde{f}$.

Είναι προφανές ότι δοθέντος του άνω φράγματος $\tilde{f}$, όσο πιο ακριβής είναι οι τιμές των $\underline{f}_L$ και $\underline{f}_R$ τόσο πιο αποδοτικό θα είναι το εξωτερικό βήμα αποκοπής. Με άλλα λόγια, θα αποκοπούν μεγαλύτερα τμήματα του διαστήματος αναζήτησης. Η ακριβέστερη δυνατή τιμή των $\underline{f}_L$ και $\underline{f}_R$ είναι $f(\underline{y})$ και $f(\bar{y})$, αντίστοιχα. Ωστόσο, αυτή η επιλογή κοστίζει δυο επιπλέον συναρτησιακούς υπολογισμούς στα άκρα κάθε υποδιαστήματος. Το επιπλέον υπολογιστικό κόστος μπορεί να αποφευχθεί χρησιμοποιώντας την ήδη γνωστή πληροφορία.

Σχήμα 4.2. Γεωμετρική ερμηνεία του εξωτερικού βήματος αποκοπής.

Υπολογίζουμε τις συναρτησιακές τιμές μόνο στα άκρα για το αρχικό διάστημα $[x]$. Μετά την εφαρμογή του Αλγορίθμου 4.2 στο αρχικό διάστημα $[x]$, ως

$$\text{OuterPrune}([x], f(\underline{x}), f(\overline{x}), F'([x]), \tilde{f}),$$

η τιμή του $\tilde{f}$ δρα ως ένα κάτω φράγμα, έστω $\hat{f}$, για την τιμή της f στα άκρα του εξωτερικά αποκοπόμενου διαστήματος $[y] \subseteq [x]$ (βλέπε Σχήμα 4.2).

4.2.3 Ο αλγόριθμος βημάτων αποκοπής

Ο Αλγόριθμος 4.1 μπορεί να εμπλουτιστεί σημαντικά όταν συνδυαστεί με τον Αλγόριθμο 4.2 ως εξής:

Αλγόριθμος 4.3 Ο αλγόριθμος αποκοπής.

```

Prune( $[y], c, f_c, [d], \tilde{f}, \hat{f}, [y_1], [y_2]$ )
1:  $[y_1] := \emptyset; [y_2] := \emptyset;$  {αρχικοποίηση των υποδιαστημάτων  $[y_1]$  και  $[y_2]$ }
2: if  $\tilde{f} < f_c$  then
3:   InnerPrune( $[y], c, f_c, [y], \tilde{f}, [y_1], [y_2]$ ); {ένα εσωτερικό βήμα αποκοπής είναι εφικτό}
4:   if  $[y_1] \neq \emptyset$  then
5:     OuterPrune( $[y_1], \hat{f}, \tilde{f}, [d], \tilde{f}$ ); {εξωτερικό βήμα αποκοπής στο  $[y_1]$  από τα αριστερά}
6:   end if
7:   if  $[y_2] \neq \emptyset$  then
8:     OuterPrune( $[y_2], \tilde{f}, \hat{f}, [d], \tilde{f}$ ); {εξωτερικό βήμα αποκοπής στο  $[y_2]$  από τα δεξιά}
9:   end if
10:   $\hat{f} := \tilde{f};$  {ανάθεση κάτω φράγματος για τα άκρα του υποδιαστήματος}
11: else
12:   $[y_1] := [y, c]; [y_2] := [c, \overline{y}];$  {υποδιαίρεσε το διάστημα στο σημείο  $c$ }
13:  OuterPrune( $[y_1], \hat{f}, f_c, [d], f_c$ ); {εξωτερικό βήμα αποκοπής από αριστερά στο  $[y_1]$ }
14:  OuterPrune( $[y_2], f_c, \hat{f}, [d], f_c$ ); {εξωτερικό βήμα αποκοπής από δεξιά στο  $[y_2]$ }
15:   $\hat{f} := f_c;$  {ανάθεση κάτω φράγματος για τα άκρα των υποδιαστημάτων  $[y_1]$  και  $[y_2]$ }
16: end if
17: return  $[y_1], [y_2], \hat{f};$ 

```

Ο παραπάνω συνδυασμένος αλγόριθμος (Αλγόριθμος 4.3) έχει ως στόχο την απόρριψη τμημάτων του χώρου αναζήτησης στα οποία η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης

είναι πάντα μεγαλύτερη από το γνωστό άνω φράγμα $\tilde{f}$ και έτσι επιταχύνει την διαδικασία αναζήτησης του ολικού ελαχίστου. Στην συνέχεια δίνεται μια λεπτομερής περιγραφή της προτεινόμενης μεθόδου.

Ο Αλγόριθμος 4.3 λαμβάνει ως είσοδο το υποδιαστήμα $[y] = [\underline{y}, \overline{y}]$, το κοινό κάτω φράγμα $\hat{f}$ για την τιμή της f στα άκρα του $[y]$, το κέντρο $c \in [y]$, $f_c = f(c)$, τα φράγματα της παραγώγου $[d] = [\underline{d}, \overline{d}]$ και το τρέχον άνω φράγμα $\tilde{f}$ και επιστρέφει το πολύ δυο υποδιαστήματα $[y_1]$ και $[y_2]$ καθώς επίσης και την τιμή του $\hat{f}$ για τα παραγόμενα υποδιαστήματα.

Σχήμα 4.3. Γεωμετρική ερμηνεία των βημάτων αποκοπής στην περίπτωση όπου $\tilde{f} < f_c$.

Τα βήματα 3–8 χειρίζονται την περίπτωση όπου μια εσωτερική αποκοπή είναι δυνατή όταν ισχύει η συνθήκη $\tilde{f} < f_c$. Μετά την εφαρμογή του εσωτερικού βήματος αποκοπής, μπορεί να εφαρμοστεί ένα βήμα εξωτερικής αποκοπής στα παραγόμενα υποδιαστήματα $[y_1]$ και $[y_2]$ όταν $\tilde{f} < \hat{f}$. Αυτό μπορεί να γίνει εφαρμόζοντας τον Αλγόριθμο 4.2 σε κάθε μη κενό υποδιαστήμα, λαμβάνοντας υπόψιν ότι: (i) η συναρτησιακή τιμή της f στο δεξί άκρο του $[y_1]$ και στο αριστερό άκρο του $[y_2]$ είναι κάτω φραγμένη από το $\tilde{f}$ και (ii), η συναρτησιακή τιμή της f στο αριστερό άκρο του $[y_1]$ και στο δεξί άκρο του $[y_2]$ κληρονομεί το κάτω φράγμα $\hat{f}$ του προγόνου τους $[y]$ (βλέπε Σχήμα 4.3). Μετά την εφαρμογή των εξωτερικών βημάτων αποκοπής, οι συναρτησιακές τιμές των άκρων των $[y_1]$ και $[y_2]$, είναι κάτω φραγμένες από την τιμή του $\tilde{f}$ (Βήμα 8). Η γεωμετρική ερμηνεία των βημάτων 3–8 απεικονίζεται στο Σχήμα 4.3 όπου συνδυάζονται τα εσωτερικά και εξωτερικά βήματα αποκοπής. Παρατηρούμε ότι δεν χρειάζεται διαμέριση αφού η διαδικασία διακλάδωσης έπεται λόγω του εσωτερικού βήματος αποκοπής.

Σχήμα 4.4. Γεωμετρική ερμηνεία των βημάτων αποκοπής στην περίπτωση όπου $\tilde{f} \geq f_c$.

Όταν το εσωτερικό βήμα αποκοπής δεν είναι δυνατό (Βήματα 10–13), ο Αλγόριθ-

μος 4.3 σχηματίζει δυο υποδιαστήματα, $[y_1]$ και $[y_2]$, υποδιαϊρώντας το $[y]$ στο σημείο c και εφαρμόζει ένα βήμα εξωτερικής αποκοπής στην αριστερή πλευρά του $[y_1]$ και στην δεξιά πλευρά του $[y_2]$, αν ισχύει $\tilde{f} < \hat{f}$ (βλέπε Σχήμα 4.4). Με αυτό τον τρόπο, επιτυγχάνεται ένα ακριβές φράγμα της συναρτησιακής τιμής $f(c)$ στο κοινό άκρο των $[y_1]$ και $[y_2]$. Πρέπει να σημειωθεί ότι είναι κρίσιμο η υποδιαίρεση να γίνει στο σημείο c όπου η συναρτησιακή τιμή $f_c = f(c)$ είναι γνωστή. Υποδιαϊρώντας το διάστημα σε οποιοδήποτε άλλο διαφορετικό σημείο, απαιτείται ένας επιπλέον συναρτησιακός υπολογισμός.

Ο Αλγόριθμος 4.3 δρα ως μια νέα διαδικασία επιτάχυνσης που χρησιμοποιεί ήδη γνωστή πληροφορία, την διαστηματική παράγωγο $F'([y])$ και μια συναρτησιακή τιμή $f(c)$ που χρησιμοποιείται στην μορφή μέσης τιμής για την επίτευξη ενός κάτω φράγματος για την f στο $[y]$. Το παρακάτω θεώρημα συνοψίζει τις ιδιότητες του Αλγόριθμου 4.3.

Θεώρημα 4.2.3 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $c \in [y] \subseteq [x] \subseteq \mathbb{R}$. Θέτουμε επίσης $f_c = f(c)$, $[d] = F'([y])$ και $\hat{f} > \tilde{f} \geq \min_{x \in [x]} f(x)$. Τότε ο Αλγόριθμος 4.3 αν εφαρμοστεί ως

$$\text{Prune}([y], \hat{f}, c, f_c, [d], \tilde{f}, [y_1], [y_2])$$

έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $[y_1] \cup [y_2] \subseteq [y]$.
2. Κάθε ολικός ελαχιστοποιητής x^* της f στο $[y]$ ικανοποιεί την συνθήκη $x^* \in [y_1] \cup [y_2]$.
3. Αν $[y_1] \cup [y_2] = \emptyset$, τότε δεν υπάρχει ολικός ελαχιστοποιητής της f στο $[y]$.

Απόδειξη. Προκύπτει από τον ορισμό των $[y_1]$ και $[y_2]$ και τα Θεωρήματα 4.2.1 και 4.2.2.

■

4.3 Ο κύριος αλγόριθμος διακλάδωσης και αποκοπής

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος βασίζεται στην αρχή της διακλάδωσης και φραξίματος. Στους αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος μπορούμε να αναπαραστήσουμε την διαδικασία αναζήτησης με ένα δέντρο, όπου κάθε κόμβος του συνδέεται με ένα διάστημα. Η ρίζα του δέντρου είναι η αρχική περιοχή αναζήτησης $[x]$, ενώ κάθε κόμβος του είναι ένα υποδιάστημα του $[x]$ που έχει το πολύ δυο απογόνους. Γενικά, το ύψος του δέντρου αναζήτησης αυξάνει σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου, επαναλαμβάνοντας τα ακόλουθα βήματα: (i) Το αρχικό διάστημα αναζήτησης υποδιαϊρείται σε μικρότερα υποδιαστήματα. (ii) Υπολογίζονται φράγματα για τις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης (και πολύ πιθανό των παραγώγων της) σε κάθε υποδιάστημα και (iii), τα υποδιαστήματα που σίγουρα δεν περιέχουν ολικούς ελαχιστοποιητές είτε διαγράφονται ολοκληρωτικά είτε τμήματα αυτών αποκόπτονται (χρησιμοποιώντας τα υπολογιζόμενα φράγματα). Τα εργαλεία που χρησιμοποιούμε για την ανάπτυξη του βασικού αλγορίθμου διακλάδωσης και αποκοπής αναφέρονται διεξοδικά στις επόμενες υποενότητες.

4.3.1 Φράσσοντας την αντικειμενική συνάρτηση

Για τον υπολογισμό ενός κάτω φράγματος της αντικειμενικής συνάρτησης f σε ένα διάστημα $[x]$, έχει πλέον καθιερωθεί να υπολογίζεται η τομή της φυσικής επέκτασης $F([x])$ με την

μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c)$ της f , όπου το κέντρο c είναι το μέσο του $[x]$, δεδομένου ότι είναι διαθέσιμο ένα διάστημα εγκλεισμού για την παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης f .

Έχουμε αποδείξει ήδη στην ενότητα 3.3.1 ότι (i) όταν χρησιμοποιείται το βέλτιστο κέντρο c^- , η αντίστοιχη μορφή μέσης τιμής $F_{MVF}([x], c^-)$ γίνεται βέλτιστη αναφορικά με το κάτω φράγμα (Θεώρημα 3.3.1) και (ii) ότι αυτή η βέλτιστη μορφή έχει και ελάχιστο πλάτος (Θεώρημα 3.3.2). Γι αυτό το λόγο, στον αλγόριθμό μας υπολογίζουμε την τομή $F_{MVF}([x], c^-) \cap F([x])$ με σκοπό να πετύχουμε το καλύτερο δυνατό κάτω φράγμα για την αντικειμενική συνάρτηση f , ακόμα και όταν το διάστημα $[x]$ είναι αρκετά μεγάλο σε πλάτος.

Ανεξαρτήτως της επιλογής του κέντρου c , η χρήση μιας μορφής μέσης τιμής απαιτεί έναν επιπλέον συναρτησιακό υπολογισμό στο σημείο c . Δείξαμε στην ενότητα 3.4 ότι αυτό το επιπλέον κόστος μπορεί να αποφευχθεί αν ισχύει μια συγκεκριμένη συνθήκη: όταν $w(F([x])) \leq \lambda \cdot w([x])$, η φυσική επέκταση $F([x])$ αρκεί για την επίτευξη του καλύτερου κάτω φράγματος και δεν χρειάζεται να εφαρμοστεί μια μορφή μέσης τιμής (βλέπε Πρόταση 3.4.1).

4.3.2 Διαδικασίες επιτάχυνσης και αποκοπής

Όπως είναι γνωστό, στους αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος η αναζήτηση για το ολικό ελάχιστο δεν γίνεται ομοιόμορφα, αλλά προτιμώνται οι κόμβοι του δέντρου που αντιστοιχούν σε υποδιαστήματα με το μικρότερο εκτιμώμενο κάτω φράγμα. Επομένως, το μονοπάτι που θα ακολουθήσουμε στο δέντρο αναζήτησης εξαρτάται άμεσα από την διαδικασία φραξίματος της αντικειμενικής συνάρτησης σε κάποιο υποδιαίστημα και κατά συνέπεια από την εκάστοτε συνάρτηση εγκλεισμού που χρησιμοποιούμε. Επιπλέον, τα βήματα αποκοπής που τυχόν χρησιμοποιούνται σε έναν τέτοιο αλγόριθμο μπορούν να μειώσουν αισθητά το πλήθος των προς εξέταση κόμβων. Στις διαστηματικές μεθόδους που χρησιμοποιούν πρώτης τάξεως πληροφορία, χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο τρία κριτήρια για να εξασφαλιστεί ότι ένα υποδιαίστημα $[y]$ δεν περιέχει κανένα ολικό ελαχιστοποιητή. Τότε, ο αντίστοιχος κόμβος αποκόπτεται και η διαδικασία αναζήτησης μετακινείται σε έναν άλλο κόμβο του δέντρου. Στη συνέχεια αναφέρουμε σύντομα τις διαστηματικές τεχνικές επιτάχυνσης της διαδικασίας αναζήτησης:

Κριτήριο ελέγχου πεδίου τιμών. Ένα διάστημα $[y]$ αποκόπτεται ολοκληρωτικά (διαγράφεται) όταν το κάτω φράγμα $\inf F([y])$ είναι μεγαλύτερο από το τρέχον άνω φράγμα $\tilde{f}$ του ολικού ελαχίστου f^* . Όταν το κριτήριο ελέγχου του πεδίου τιμών αποτυγχάνει να αποκόψει το $[y]$, τότε αυτό αποθηκεύεται σε μια λίστα, η οποία περιέχει υποψήφια διαστήματα για περαιτέρω διερεύνηση.

Cut-off test. Όταν το $\tilde{f}$ βελτιώνεται, τότε το κριτήριο ελέγχου πεδίου τιμών εφαρμόζεται για όλα τα υποψήφια διαστήματα στην λίστα. Προφανώς, όσο καλύτερη είναι η βελτίωση του $\tilde{f}$, τόσο πιο αποτελεσματικό είναι το cut-off test.

Κριτήριο μονοτονίας. Σε μερικές περιπτώσεις καθορίζει πότε η αντικειμενική συνάρτηση f είναι αυστηρά μονότονη σε ένα διάστημα $[y]$. Αν $0 \notin F'([y])$ τότε το διάστημα $[y]$ διαγράφεται.

Το παραπάνω σύνολο διαδικασιών επιτάχυνσης μπορεί να επανληφθεί προσθέτοντας τα βήματα αποκοπής που περιγράφηκαν στην προηγούμενη ενότητα. Όπως έχει ήδη ανα-

φερθεί, ο Αλγόριθμος 4.3 είναι υπεύθυνος για την διαδικασία διακλάδωσης στην περίπτωση που χρησιμοποιηθεί σε έναν διαστηματικό αλγόριθμο διακλάδωσης και φραξίματος. Όταν όλα τα προηγούμενα κριτήρια αποτυγχάνουν, ο Αλγόριθμος 4.3 δεν δημιουργεί μόνο τους απογόνους του κόμβου πατέρα, αλλά επίσης απορρίπτει τμήματα του διαστήματος όπου δεν εντοπίζεται το ολικό ελάχιστο. Με αυτό τον τρόπο ο χώρος αναζήτησης περιορίζεται και ολόκληρη η διαδικασία επιταχύνεται επιπλέον.

Παρατηρούμε ωστόσο ότι ο Αλγόριθμος 4.3 αυξάνει το υπολογιστικό κόστος κατά ένα συναρτησιακό υπολογισμό, αφού απαιτείται η συναρτησιακή τιμή $f(c)$ σε κάποιο σημείο c . Αυτό το επιπλέον κόστος μπορεί να αποφευχθεί, αν εκμεταλλευτούμε τη συναρτησιακή τιμή $f(c^-)$ στο βέλτιστο κέντρο c^- , που απαιτείται από τη βέλτιστη μορφή μέσης τιμής κατά τη διαδικασία υπολογισμού ενός κάτω φράγματος για την f .

Αφού η τιμή $f(c^-)$ είναι πλέον γνωστή, εφοδιάζουμε τον Αλγόριθμο 4.3 με το c^- (και το $f(c^-)$). Σε διαφορετική περίπτωση, επιλέγουμε ως c το μέσο του διαστήματος, προσθέτοντας έναν συναρτησιακό υπολογισμό. Σε κάθε περίπτωση, ένας συναρτησιακός υπολογισμός σε κάποιο σημείο c αποβλέπει στην βελτίωση του άνω φράγματος $\tilde{f}$.

Αλγόριθμος 4.4 Η επιλογή του κέντρου c .

```

SelectCenter( $[y]$ ,  $[d]$ ,  $F([y])$ ,  $\epsilon$ ,  $c$ )
1:  $\lambda := -\bar{d} \cdot \underline{d} / w([d]);$  { υπολογισμός σταθεράς  $\lambda$  όπως στην Πρόταση 3.4.1 }
2: if  $w(F([y])) \leq \lambda \cdot w([y])$  then
3:    $c := m([y]);$  { επιλέγουμε ως κέντρο το μέσο του διαστήματος }
4: else
5:    $c := \text{OptimalCenter}([y], [d]);$  { επιλέγουμε το βέλτιστο κέντρο  $c^-$  }
6:   if  $w([y]) > \epsilon$  then
7:     if  $(c - \underline{y}) < \epsilon$  then
8:        $c := \underline{y} + \epsilon;$  {  $c$  τείνει στο αριστερό άκρο }
9:     end if
10:    if  $(\bar{y} - c) < \epsilon$  then
11:       $c := \bar{y} - \epsilon;$  {  $c$  τείνει στο δεξί άκρο }
12:    end if
13:  end if
14: end if
15: return  $c;$ 

```

Ο Αλγόριθμος 4.4 καθορίζει τον τρόπο επιλογής του σημείου c . Τα περισσότερα από τα βήματα του αλγορίθμου είναι αυτονόητα, εκτός από τα βήματα 6–10, τα οποία είναι υπεύθυνα για την προσαρμογή του βέλτιστου κέντρου c^- όταν αυτό τείνει προς το αριστερό ή το δεξί άκρο του διαστήματος, δηλαδή όταν $\underline{d} \rightarrow 0^-$ ή $\bar{d} \rightarrow 0^+$, αντίστοιχα (βλέπε τον ορισμό του c^- στην σχέση (3.3.5)). Σε αυτή την περίπτωση είναι αυτονόητο ότι η συνάρτηση f τείνει να γίνει γνησίως αύξουσα ή φθίνουσα, στο υπό εξέταση διάστημα. Γι αυτόν το λόγο, ρυθμίζουμε το c^- με τέτοιο τρόπο ώστε να σχηματιστεί ένα διάστημα με πλάτος ϵ (η προκαθορισμένη ακρίβεια) στην περίπτωση όπου στην επόμενη επανάληψη γίνει υποδιαίρεση σε αυτό το σημείο. Αξίζει να σημειωθεί ότι το φαινόμενο αυτό παρατηρείται

όταν βρισκόμαστε στην περιοχή του ολικού ελαχίστου.

4.3.3 Κριτήριο τερματισμού

Για να εξασφαλίσουμε την πεπερασμένη σύγκλιση του αλγορίθμου πρέπει να καθορίσουμε ένα κριτήριο τερματισμού. Στον αλγόριθμο που θα παρουσιάσουμε στην Ενότητα 4.3.5 έχουμε υιοθετήσει ένα αυστηρό κριτήριο τερματισμού τόσο για το ολικό ελάχιστο, όσο και για τους ολικούς ελαχιστοποιητές. Ένα διάστημα $[y]$ γίνεται αποδεκτό ως ένα διάστημα λύσης και προστίθεται στην λίστα αποτελεσμάτων L^* αν ισχύει μία από τις ακόλουθες συνθήκες:

- είτε το σχετικό πλάτος¹ του $[y]$ είναι μικρότερο ή ίσο από την προκαθορισμένη από τον χρήστη ακρίβεια ϵ , δηλαδή,

$$w_{\text{rel}}([y]) \leq \epsilon,$$

- είτε το σχετικό πλάτος του διαστήματος εγκλεισμού $F([y])$ είναι μικρότερο ή ίσο από την προκαθορισμένη από τον χρήστη ακρίβεια ϵ , δηλαδή,

$$w_{\text{rel}}(F([y])) \leq \epsilon.$$

Στην πρώτη περίπτωση, το διάστημα $[y]$ είναι αρκετά μικρό και έτσι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης μπορεί να εμποδίσουν περαιτέρω βελτίωση των φραγμάτων του $F([y])$, ενώ στην τελευταία περίπτωση η συνάρτηση είναι επίπεδη στο $[y]$. Πιθανά άλλα κριτήρια τερματισμού έχουν αναφερθεί στο κλασικό βιβλίο των Ratschek και Rokne [RR88, σελ. 81].

4.3.4 Οργάνωση λίστας

Όπως αναφέραμε στο Κεφάλαιο 2, Ενότητα 2.4, η αποδοτικότητα μιας μεθόδου φραξίματος και αποκοπής εξαρτάται σημαντικά από τον τρόπο που διατρέχεται το δέντρο αναζήτησης ή, με απλά λόγια, από την επιλογή του επόμενου διαστήματος (κόμβου) που θα επιλέξουμε για περαιτέρω επεξεργασία. Στον αλγόριθμό μας η επιλογή γίνεται σύμφωνα με το υβριδικό σχήμα που έχουμε αναφέρει στην Ενότητα 2.4.2. Εν περιλήψει, η αναζήτηση για το ολικό ελάχιστο γίνεται σύμφωνα με την στρατηγική *best-first*, όπου επιλέγεται το διάστημα με το μικρότερο κάτω φράγμα για την αντικειμενική συνάρτηση f .

Τα υποψήφια υποδιαστήματα $[y_i]$ αποθηκεύονται σε μια λίστα εργασίας L . Τα στοιχεία της L ταξινομούνται σε μη αύξουσα σειρά ως προς το κάτω φράγμα $\inf F([y_i])$ και σε αύξουσα σειρά ως προς την ηλικία τους (βλέπε [HHKR95]). Η λογική πίσω από αυτό τον κανόνα είναι ότι αφού προσπαθούμε να βρούμε το ολικό ελάχιστο, πρέπει να συγκεντρωθούμε στο πιο υποσχόμενο διάστημα, δηλαδή σε αυτό που περιέχει το μικρότερο κάτω φράγμα. Μια εναλλακτική στρατηγική επιλογής, που καλείται *δείκτης απόρριψης*, έχει προταθεί και μελετηθεί εκτενώς στις εργασίες [CMG01, Cse01].

4.3.5 Περιγραφή του αλγορίθμου

Στη συνέχεια δίνουμε μια λεπτομερή αλγοριθμική διατύπωση της προτεινόμενης μεθόδου ολικής βελτιστοποίησης. Όλες οι ιδέες που περιγράφηκαν στις προηγούμενες ενότητες

¹Για τον ορισμό του σχετικού πλάτους ενός διαστήματος βλέπε σελ.4.

ενσωματώνονται στον Αλγόριθμο 4.5. Ο αλγόριθμος λαμβάνει ως είσοδο την αντικειμενική συνάρτηση f , το αρχικό διάστημα αναζήτησης $[x]$ και την ακρίβεια ϵ , και επιστρέφει ένα διάστημα εγγλεισμού $[f^*]$ για το ολικό ελάχιστο f^* , καθώς επίσης και μία λίστα L^* αποτελεσμάτων, η οποία περιέχει διαστήματα εγγλεισμού για τους ολικούς ελαχιστοποιητές.

Αλγόριθμος 4.5 Ο αλγόριθμος διακλάδωσης και αποκοπής.

```

BranchAndPrune( $f, [x], \epsilon, [f^*], L^*$ )
1:  $L = \{\}$ ;  $L^* = \{\}$ ;
2: SelectCenter( $[x], F'([x]), F([x]), \epsilon, c$ );
3:  $\tilde{f} := \min\{\sup F(\underline{x}), \sup F(\overline{x}), \sup F(c)\}$ ;
4: if  $\tilde{f} \geq \sup F(\underline{x})$  then
5:    $L^* := L^* \uplus ([\underline{x}, \underline{x}], \inf F(\underline{x}))$ ;
6: if  $\tilde{f} \geq \sup F(\overline{x})$  then
7:    $L^* := L^* \uplus ([\overline{x}, \overline{x}], \inf F(\overline{x}))$ ;
8: OuterPrune( $[x], \inf F(\underline{x}), \inf F(\overline{x}), F'([x]), \tilde{f}$ );
9:  $\hat{f} := \tilde{f}$ ;
10:  $F_{[x]} := (F(c) + F'([x]) ([x] - c)) \cap F([x])$ ;
11:  $L := L \uplus ([x], \inf F_{[x]}, F'([x]), c, F(c), \hat{f})$ ;
12: while  $L \neq \{\}$  do
13:   ( $[y], \inf F_{[y]}, F'([y]), c, F(c), \hat{f}$ ) := PopHead( $L$ );
14:   Prune( $[y], c, \inf F(c), F'([y]), \tilde{f}, \hat{f}, [y_1], [y_2]$ );
15:   for  $i := 1$  to 2 do
16:     if  $[y_i] = \emptyset$  then next  $i$ ;
17:     if  $0 \notin F'([y_i])$  then next  $i$ ;
18:     SelectCenter( $[y_i], F'([y_i]), F([y_i]), \epsilon, c$ );
19:     if  $\sup F(c) < \tilde{f}$  then
20:        $\tilde{f} := \sup F(c)$ ;
21:       CutOffTest( $L, \tilde{f}$ );
22:        $F_{[y]} := (F(c) + F'([y_i]) ([y_i] - c)) \cap F([y_i])$ ;
23:       if  $\inf F_{[y]} \leq \tilde{f}$  then
24:         if  $w_{\text{rel}}(F_{[y]}) \leq \epsilon$  or  $w_{\text{rel}}([y_i]) \leq \epsilon$  then
25:            $L^* := L^* \uplus ([y_i], \inf F_{[y]})$ ;
26:         else
27:            $L := L \uplus ([y_i], \inf F_{[y]}, F'([y_i]), c, F(c), \hat{f})$ ;
28:       end for
29:   end while
30:   ( $[y], \inf F_{[y]}$ ) := Head( $L^*$ );  $[f^*] = [\inf F_{[y]}, \tilde{f}]$ ;
31:   CutOffTest( $L^*, \tilde{f}$ );
32: return  $[f^*], L^*$ ;

```

Πρέπει να τονιστεί ότι η διαστηματική αριθμητική χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του $f(c)$ ώστε να φραχθούν όλα τα σφάλματα στρογγυλοποίησης. Έτσι, κάθε φορά που χρειάζεται ένας συναρτησιακός υπολογισμός σε ένα σημείο, χρησιμοποιούμε τη φυσική διαστηματική επέκταση F για τον υπολογισμό της συναρτησιακής τιμής. Επιπλέον, ιδιαίτερη προσοχή χρειάζεται για την αποφυγή λαθών στρογγυλοποίησης κατά τον υπολογισμό των σημείων p, q, r και s , τα οποία ορίζουν τα τμήματα που αποκόπτονται από την περιοχή αναζήτησης κατά την διαδικασία των γραμμικών βημάτων αποκοπής στους Αλγορίθμους 4.1

και 4.2 (για περισσότερες λεπτομέρειες βλέπε [Rat98]).

Αρχικά, η λίστα εργασίας L και η λίστα αποτελεσμάτων L^* είναι κενές. Μετά τον υπολογισμό του $F'([x])$, ο Αλγόριθμος 4.4 καλείται για να δώσει ένα κέντρο c και το άνω φράγμα $\tilde{f}$ αρχικοποιείται ως το ελάχιστο του $\sup F(\underline{x})$, $\sup F(\bar{x})$ και $\sup F(c)$.

Στα Βήματα 4–7, χειριζόμαστε τα συνοριακά σημεία χωριστά και τα προσθέτουμε στην λίστα αποτελεσμάτων αν είναι υποψήφια για ελαχιστοποιητές. Στο Βήμα 8, ο Αλγόριθμος 4.2 καλείται για να αποκόψει εξωτερικά το αρχικό διάστημα $[x]$ χρησιμοποιώντας τις ακριβείς συναρτησιακές τιμές $f(\underline{x})$ και $f(\bar{x})$ που ήδη έχουν υπολογιστεί στο Βήμα 3. Στο Βήμα 9 θέτουμε το κοινό κάτω φράγμα $\hat{f}$ για την τιμή της συνάρτησης στα άκρα του εξωτερικά αποκοπτόμενου διαστήματος. Στην συνέχεια, Βήμα 10, υπολογίζουμε ένα διάστημα εγκλεισμού της f στο $[x]$, σύμφωνα με την διαδικασία που περιγράφεται στην Ενότητα 4.3.1 και προσθέτουμε το αποκομμένο διάστημα στην λίστα εργασίας L . Στον αλγόριθμό μας, οι κόμβοι της λίστας εργασίας (ή του δέντρου), περιέχουν μία δομή η οποία εκτός του διαστήματος $[x]$ περιέχει και όλη την απαραίτητη πληροφορία που σχετίζεται με το τρέχον διάστημα.

Τα Βήματα 13–28 εφαρμόζονται σε κάθε υποψήφιο διάστημα $[y]$ μέχρι να αδειάσει η λίστα εργασίας L . Ο αλγόριθμος παίρνει το πρώτο στοιχείο από την L και καλεί τον Αλγόριθμο 4.3 προκειμένου να εφαρμόσει ένα εσωτερικό βήμα αποκοπής (διακλάδωση) καθώς και εξωτερικά βήματα αποκοπής στα παραγόμενα υποδιαστήματα προκειμένου να περιορίσει επιπλέον το διάστημα αναζήτησης (βλέπε Ενότητα 4.2.3). Για κάθε μη κενό υποδιάστημα $[y_i]$ που επιστρέφεται από το βήμα αποκοπής εφαρμόζεται το κριτήριο της μονotonίας. Όταν αυτό το κριτήριο αποτυγχάνει, επιλέγεται ένα κέντρο c για το $[y_i]$ σύμφωνα με τον Αλγόριθμο 4.4. Όταν αλλάζει το άνω φράγμα $\tilde{f}$, εφαρμόζεται το cut–off test στην λίστα εργασίας L (Βήματα 19–21). Μετά το φράξιμο του πεδίου τιμών της f στο $[y_i]$, εφαρμόζεται στο Βήμα 23 το κριτήριο ελέγχου πεδίου τιμών και το $[y_i]$ προστίθεται είτε στην λίστα αποτελεσμάτων L^* ή στην λίστα εργασίας L σύμφωνα με το κριτήριο τερματισμού (Βήματα 24–27).

Όταν δεν περιέχεται κανένα υποψήφιο διάστημα στην λίστα εργασίας, ο αλγόριθμος τερματίζει επιστρέφοντας ένα διάστημα εγκλεισμού για το ολικό ελάχιστο $[f^*]$ καθώς επίσης και όλα τα στοιχεία της λίστας αποτελεσμάτων L^* . Το ακόλουθο θεώρημα θεμελιώνει την ορθότητα του Αλγόριθμου 4.5.

Θεώρημα 4.3.1 Έστω ότι η $f : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι μια C^1 συνάρτηση, $[x] \subseteq \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}$, και $\epsilon > 0$. Τότε ο Αλγόριθμος 4.5 έχει τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $f^* \in [f^*]$.
2. $[x]^* \subseteq \bigcup_{([y], \inf F_{[y]}) \in L^*} [y]$.

Απόδειξη. Η Ιδιότητα 1 είναι άμεση συνέπεια του γεγονότος ότι $f^* = \min_{x \in [x]} f(x) \leq \tilde{f}$ ενώ τα στοιχεία της λίστας αποτελεσμάτων L^* ταξινομούνται σε μη αύξουσα σειρά ως προς το $\inf F_{[y]}$. Η Ιδιότητα 2 είναι συνέπεια του γεγονότος ότι καμία διαδικασία επιτάχυνσης που χρησιμοποιείται στον αλγόριθμο δεν απορρίπτει (διαγράφει) έναν ολικό ελαχιστοποιητή της συνάρτησης f . ■

4.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Ο Αλγόριθμος 4.5 έχει υλοποιηθεί και ελεγχθεί σε ένα υπολογιστικό σύστημα με επεξεργαστή Pentium III στα 866MHz με 256MB RAM και λειτουργικό σύστημα Linux. Για την υλοποίηση χρησιμοποιήθηκε η γλώσσα προγραμματισμού C++ χρησιμοποιώντας την επισημονική βιβλιοθήκη C-XSC-2.0 [HK04]. Οι συναρτήσεις εγγλεισμού έχουν υλοποιηθεί με χρήση των ρουτινών της βιβλιοθήκης C-XSC ενώ οι παράγωγοι υπολογίζονται με την εμπρόσθια αυτόματη διαφορίση [HHKR95]. Όλοι οι υπολογισμοί, ακόμη και οι υπολογισμοί κινητής υποδιαστολής, έχουν εκτελεστεί χρησιμοποιώντας στρογγυλοποιημένη διαστηματική αριθμητική.

Συγκρίνουμε την μέθοδό μας με τρεις μεθόδους οι οποίες έχουν προταθεί τα τελευταία τρία χρόνια ως οι πιο αποδοτικές. Οι μέθοδοι με τις οποίες συγκρινόμαστε, χρησιμοποιούν τον ίδιο τύπο πληροφορίας, δηλαδή, υπολογισμούς της αντικειμενικής συνάρτησης και της συνάρτησης εγγλεισμού της παραγώγου. Στη συνέχεια, τις αναφέρουμε περιληπτικά:

1. *Κλασσική μέθοδος*: χρησιμοποιεί το κριτήριο της μονοτονίας, το cut—off test και την διχοτόμηση ως κανόνα υποδιαίρεσης. Ωστόσο, έχουμε τροποποιήσει τη μέθοδο αυτή, για μία δίκαιη αριθμητική σύγκριση. Τα φράγματα έχουν ληφθεί από την τομή της μορφής μέσης τιμής και της φυσικής επέκτασης, όπου το κέντρο της μορφής μέσης τιμής είναι το βελτιστοποιημένο κέντρο c^- .
2. *Μέθοδος «kite»*: Προτάθηκε στην εργασία [VLC], η οποία χρησιμοποιεί την συνάρτηση εγγλεισμού «kite» που παράγεται από την ταυτόχρονη χρήση της μορφής μέσης τιμής και της γραμμικής συνοριακής μορφής (linear boundary value form) [Neu90, σελ. 60]. Το βέλτιστο κέντρο της μορφής «kite» έχει προσεγγιστεί όπως περιγράφεται στην εργασία [VLC] ενώ το κάτω φράγμα για την συνάρτηση εγγλεισμού λαμβάνεται πάντα ως η καλύτερη τιμή μεταξύ του μέγιστου κάτω φράγματος της φυσικής επέκτασης και της συνάρτησης εγγλεισμού «kite». Το κριτήριο της μονοτονίας και το cut—off test χρησιμοποιούνται επίσης στην μέθοδο «kite» όπου έχουμε υιοθετήσει ως κανόνα υποδιαίρεσης τον διαχωρισμό των διαστημάτων στο προσεγγιζόμενο βέλτιστο κέντρο της μορφής αυτής. Αυτή η προσέγγιση αποφεύγει επιπλέον συναρτησιακούς υπολογισμούς στα μέσα των διαστημάτων. Όπως προτείνεται στην εργασία [VLC], τα βήματα αποκοπής μπορούν να εφαρμοστούν μόνο στο τέλος του αλγορίθμου όταν έχουν απομονωθεί τα ολιγά ελάχιστα. Ο ακριβής τρόπος που εφαρμόζονται δεν είναι σαφής, γι' αυτό το λόγο στην υλοποίησή μας τα βήματα αποκοπής δεν έχουν ενσωματωθεί.
3. *Μέθοδος Casado et al.*: Η μέθοδος αυτή προτάθηκε στην εργασία [CMGS03], όπου οι συγγραφείς προτείνουν μια νέα βοηθητική συνάρτηση για την διαδικασία φραξίματος. Στην πραγματικότητα, η προτεινόμενη βοηθητική συνάρτηση είναι μια τροποποίηση της γραμμικής συνοριακής μορφής [Neu90] χωρίς την ανάγκη ακριβών συναρτησιακών τιμών στα άκρα. Αντ' αυτού, μόνο τα κάτω φράγματα χρειάζονται (βλέπε [CMGS03, Θεώρημα 3]). Η μέθοδος εφαρμόζει το κριτήριο της μονοτονίας, το cut—off test και την διχοτόμηση ως κανόνα υποδιαίρεσης. Επιπλέον, η αποκοπή επιτυγχάνεται μέσω

ενός τεστ που χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία και περιγράφεται εκτενώς στην εργασία [CMGS03].

Όλοι οι παραπάνω μέθοδοι έχουν υλοποιηθεί και αποτιμηθεί σε 40 ελεγκτικές συναρτήσεις² που αρχικά προτάθηκαν από τους Casado et al. στην εργασία [CMGS03]. Πρέπει να σημειωθεί ότι το συγκεκριμένο σύνολο ελεγκτικών συναρτήσεων είναι από τα πιο δύσκολα και πλήρη που έχουν προταθεί στην βιβλιογραφία μέχρι σήμερα. Στον Πίνακα 4.2 (σελ. 84) δίνονται οι ελεγκτικές συναρτήσεις $f(x)$, τα διαστήματα αναζήτησης, ο αριθμός των τοπικών ελαχιστοποιητών, ο αριθμός των ολικών ελαχιστοποιητών καθώς και η τιμή του ολικού ελαχίστου f^* . Στο Παράρτημα (σελ. 105) μπορεί κανείς να δει τις γραφικές παραστάσεις των ελεγκτικών συναρτήσεων καθώς και την έξοδο του προγράμματος για κάθε πρόβλημα.

Σε όλες τις υλοποιήσεις έχει χρησιμοποιηθεί ένα κοινό κριτήριο τερματισμού για όλες τις μεθόδους:

$$w_{\text{rel}}(F_{[y]}) \leq \epsilon \quad \text{ή} \quad w_{\text{rel}}([y]) \leq \epsilon,$$

όπου $\epsilon = 10^{-8}$. Συγκριτικά αποτελέσματα μεταξύ της κλασσικής μεθόδου (T), την μέθοδο kite (K), την μέθοδο του Casado et al. (C) και της προτεινόμενης μεθόδου (P) συνοψίζονται στον Πίνακα 4.1. Για κάθε ελεγκτική συνάρτηση αναφέρουμε τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών (με χρήση διαστηματικής αριθμητικής), τον αριθμό των απαιτούμενων παραγώγων, τον αριθμό των υποδιαιρέσεων και το μέγιστο μήκος της λίστας εργασίας L . Στο τέλος του Πίνακα 4.1 δίνουμε το συνολικό υπολογιστικό κόστος που απαιτείται και για τις 40 ελεγκτικές συναρτήσεις αθροίζοντας τους επί μέρους δείκτες αποδοτικότητας.

Σύμφωνα με τον Πίνακα 4.1, η μέθοδός μας παρουσιάζει την καλύτερη απόδοση ανάμεσα στις μεθόδους kite και Casado et al. όταν όλες συγκριθούν με την κλασική μέθοδο. Συνολικά, έχουμε 37% βελτίωση στον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών, 38% στον αριθμό των παραγώγων και 10% βελτίωση στο μήκος της λίστας. Η βελτίωση κατά 87% στον αριθμό των υποδιαιρέσεων φανερώνει ότι ο αλγόριθμός μας χρησιμοποιεί κυρίως το εσωτερικό βήμα αποκοπής για την διαδικασία διακλάδωσης. Σε σύνολο 40 προβλημάτων ο αλγόριθμος αναγκάστηκε να υποδιαιρέσει το διάστημα στο κατάλληλο σημείο c , μόνο 260 φορές. Η υποδιαίρεση λαμβάνει χώρα όταν το ολικό ελάχιστο έχει επιτευχθεί και ο αλγόριθμος προσπαθεί να απομονώσει τον ολικό ελαχιστοποιητή μέσα στο διάστημα μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού. Στο σημείο αυτό, πρέπει να τονίσουμε τη σημαντικότητα της στρατηγικής που υιοθετήσαμε στον Αλγόριθμο 4.5 για την υποδιαίρεση ενός διαστήματος όταν αυτή κρίνεται απαραίτητη. Δηλαδή, να υποδιαιρούμε το διάστημα στο βέλτιστο κέντρο c^- .

Από τον Πίνακα 4.1 μπορούμε να παρατηρήσουμε σημαντική βελτίωση στο απαιτούμενο υπολογιστικό κόστος και ειδικότερα στα τελευταία τρία προβλήματα (38, 39, 40),

²Για τις συναρτήσεις 31 και 35 οι τιμές των a_i , k_i και c_i είναι:

$a = (3.040, 1.098, 0.674, 3.537, 6.173, 8.679, 4.503, 3.328, 6.937, 0.700),$

$k = (2.983, 2.378, 2.439, 1.168, 2.406, 1.236, 2.868, 1.378, 2.348, 2.268),$

$c = (0.192, 0.140, 0.127, 0.132, 0.125, 0.189, 0.187, 0.171, 0.188, 0.176)$ και

$a = (4.696, 4.885, 0.800, 4.986, 3.901, 2.395, 0.945, 8.371, 6.181, 5.713),$

$k = (2.871, 2.328, 1.111, 1.263, 2.399, 2.629, 2.853, 2.344, 2.592, 2.929),$

$c = (0.149, 0.166, 0.175, 0.183, 0.128, 0.117, 0.115, 0.148, 0.188, 0.198),$ αντίστοιχα.

τα οποία θεωρούνται ιδιαίτερα δύσκολα για διαστηματικές μεθόδους λόγω της μεγάλης υπερεκτίμησης στον εγκλεισμό του πεδίου τιμών. Για παράδειγμα, στο πρόβλημα 40 οι συναρτησιακές τιμές που απαιτήθηκαν από τον αλγόριθμό μας ήταν 650 σε αντίθεση με τον αλγόριθμο των Casado et al., στον οποίο απαιτήθηκαν 1383 συναρτησιακοί υπολογισμοί. Η βελτίωση δηλαδή είναι 53% στο συγκεκριμένο παράδειγμα. Παρόμοιες βελτιώσεις μπορεί κανείς να παρατηρήσει και σε άλλα παραδείγματα. Εν κατακλείδι, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι σε όλα τα προβλήματα η προτεινόμενη μέθοδος υπερέχει έναντι των άλλων. Επιπλέον, τα διαστήματα εγκλεισμού των λύσεων (για το ολικό ελάχιστο καθώς και για τους ολικούς ελαχιστοποιητές) που παράγει ο αλγόριθμός μας έχουν πάντα μικρότερο πλάτος. Στο Παράρτημα (σελ. 105), για κάθε πρόβλημα, μπορεί κανείς να δει εκτός από τις λύσεις και το αντίστοιχο πλάτος του εκάστοτε διαστήματος εγκλεισμού.

Ο συνολικός υπολογιστικός χρόνος είναι ένας κατάλληλος δείκτης για την μέτρηση της απόδοσης των αλγορίθμων. Όσον αφορά το συνολικό υπολογιστικό χρόνο (CPU time) που απαιτήθηκε για την επίλυση των 40 προβλημάτων, οι χρόνοι εκτέλεσης ήταν:

- Η κλασική μέθοδος (T) χρειάστηκε 0.72 seconds.
- Η μέθοδος «kite» (K) χρειάστηκε 1.02 seconds.
- Η μέθοδος Casado et al. (C) χρειάστηκε 0.92 seconds.
- Η προτεινόμενη μέθοδος (P) χρειάστηκε 0.45 seconds.

Οι παραπάνω χρόνοι εκτέλεσης δείχνουν την καθολική ανωτερότητα της προτεινόμενης μεθόδου, αφού προσφέρει σημαντική εξοικονόμηση χρόνου.

4.5 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάσαμε έναν αλγόριθμο διακλάδωσης και φραξίματος για τον υπολογισμό εγγυημένων φραγμάτων για το ολικό ελάχιστο και όλων των ολικών ελαχιστοποιητών μονοδιάστατων συναρτήσεων όταν η ανεξάρτητη μεταβλητή είναι περιορισμένη σε ένα κλειστό και φραγμένο διάστημα. Ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία, μια νέα διαδικασία αποκοπής καθώς επίσης και μια νέα στρατηγική διακλάδωσης ώστε να επιταχύνει την διαδικασία αναζήτησης. Τα γραμμικά βήματα αποκοπής (εσωτερικά και εξωτερικά) είναι υπεύθυνα για την διαδικασία διακλάδωσης και αποκλείουν μεγάλα τμήματα του χώρου αναζήτησης όταν δεν υπάρχει ολικός ελαχιστοποιητής. Ο αλγόριθμος εκμεταλλεύεται τις ιδιότητες του βέλτιστου κέντρου c^- όχι μόνο για τη διαδικασία παραγωγής αξιόπιστων κάτω φραγμάτων για την αντικειμενική συνάρτηση, αλλά και στη διαδικασία αποκοπής περιοχών όπου με εγγύηση δεν υφίσταται ολικός ελαχιστοποιητής.

Επιπλέον, το εσωτερικό βήμα αποκοπής που προτάθηκε συνιστά μία νέα στρατηγική διακλάδωσης για διαστηματικούς αλγορίθμους διακλάδωσης και φραξίματος. Η στρατηγική αυτή μπορεί να θεωρηθεί βέλτιστη διότι όχι μόνο επιτυγχάνουμε την διακλάδωση, αλλά ταυτοχρόνως απορρίπτουμε τμήματα όπου δεν υπάρχει βέλτιστη λύση. Στην περίπτωση όπου κάτι τέτοιο δεν είναι εφικτό, η υποδιαίρεση του διαστήματος δε γίνεται στο μέσο (διχοτόμηση) αλλά στο βέλτιστο κέντρο c^- ευελπιστώντας ότι στα παραγόμενα υποδιαστήματα η συνάρτηση να γίνει μονότονη. Πειραματικά, έχουμε επαληθεύσει ότι η στρατηγική αυτή

απομονώνει πολύ σύντομα τους ολικούς ελαχιστοποιητές. Στο σύνολο των 40 προβλημάτων έχουμε παρατηρήσει ότι το 68% – 72% του συνολικού υπολογιστικού κόστους δαπανάται για τον εγλκισμό ενός ολικού ελαχιστοποιητή με την απαιτούμενη ακρίβεια ϵ . Ωστόσο, το ολικό ελάχιστο έχει απομονωθεί – εντοπιστεί σε πρώιμα βήματα του αλγορίθμου.

Ο αλγόριθμός μας έχει υλοποιηθεί και δοκιμαστεί σε ένα καθιερωμένο σύνολο από 40 ελεγκτικές συναρτήσεις και συγκρίνεται με την κλασσική μέθοδο, την μέθοδο kite και την μέθοδο των Casado et al. Τα αριθμητικά αποτελέσματα δείχνουν ότι η προτεινόμενη μέθοδος πάντα υπερिσχύει των υπολοίπων.

Πίνακας 4.1. Συγκριτικά αποτελέσματα 40 ελεγκτικών συναρτήσεων.

No	Function eval.				Derivative eval.				Subdivisions				List length			
	T	K	C	P	T	K	C	P	T	K	C	P	T	K	C	P
1	61	46	114	31	37	27	30	17	18	13	8	5	3	3	3	3
2	73	52	62	42	43	29	18	23	21	14	4	6	4	5	4	4
3	70	62	72	60	39	31	19	31	19	15	11	7	2	2	3	2
4	69	66	92	38	41	39	30	21	20	19	10	6	3	2	3	2
5	85	88	113	56	53	55	35	33	26	27	9	3	1	2	3	3
6	65	62	95	27	39	37	33	15	19	18	15	6	2	2	3	2
7	55	54	79	30	33	33	28	18	16	16	7	7	1	1	3	1
8	71	61	89	33	43	37	31	19	21	18	9	7	1	1	3	1
9	71	80	110	45	43	49	38	24	21	24	12	5	2	2	5	3
10	68	83	109	40	41	51	39	22	20	25	12	7	2	2	4	2
11	58	61	91	37	35	37	32	21	17	18	11	8	1	2	3	2
12	60	61	93	32	37	37	33	18	18	18	10	5	2	2	3	2
13	68	64	96	33	41	39	36	20	20	19	14	4	3	2	4	3
14	82	89	128	49	53	57	45	30	26	28	12	6	2	3	4	2
15	102	89	109	47	59	51	37	25	29	25	9	4	5	6	6	5
16	104	100	128	53	59	57	41	29	29	28	11	7	8	8	8	4
17	77	103	147	48	49	65	52	28	24	32	14	6	2	3	4	3
18	103	76	102	54	65	45	28	31	32	22	6	3	3	3	3	3
19	138	90	100	44	83	51	30	21	41	25	1	1	2	2	2	2
20	110	43	86	14	71	27	28	7	35	13	1	3	2	1	2	2
21	122	66	84	22	75	39	26	11	37	19	1	3	2	2	2	2
22	93	122	154	69	55	71	54	41	27	35	15	8	3	4	6	3
23	105	150	188	82	61	87	66	47	30	43	20	9	3	4	5	4
24	100	131	194	74	61	75	68	43	30	37	15	9	4	4	6	3
25	104	119	203	91	65	75	75	57	32	37	17	11	3	4	6	3
26	154	112	153	63	97	69	41	37	48	34	7	7	4	4	4	4
27	130	162	246	89	81	103	88	55	40	51	17	3	4	4	7	5
28	153	105	144	56	97	65	38	33	48	32	11	5	3	3	4	3
29	131	164	226	95	81	93	80	55	40	46	16	6	5	5	6	4
30	211	148	211	80	135	93	55	49	67	46	14	5	4	4	5	4
31	93	111	131	78	53	65	42	42	26	32	13	9	4	5	8	4
32	412	283	425	173	263	177	111	105	131	88	10	7	8	8	9	8
33	298	279	387	181	173	161	129	103	86	80	22	8	15	16	17	15
34	171	253	322	126	95	131	114	71	47	65	21	10	5	6	9	5
35	233	263	346	177	125	135	114	97	62	67	12	10	7	6	12	7
36	428	491	708	319	213	245	240	175	106	122	19	8	11	9	16	10
37	226	295	398	148	125	157	143	82	62	78	27	11	9	8	14	6
38	436	476	636	310	279	243	226	184	139	121	36	8	24	10	18	10
39	1,083	1,188	1,797	791	545	597	601	430	272	298	67	8	26	20	42	23
40	851	896	1,383	650	425	447	456	339	212	223	54	9	25	19	42	25
Σ	7,124	7,244	10,351	4,487	4,068	3,982	3,430	2,509	2,014	1,971	600	260	220	199	311	199
	102%	145%	63%		98%	84%	62%		98%	30%	13%		90%	141%	90%	

Πίνακας 4.2. Ελεγκτικές συναρτήσεις

No	Συνάρτηση $f(x)$	$[x]$	LM	GM	f^*
1	$e^{-3x} - \sin^3 x$	[0,20]	4	1	$e^{\frac{-27\pi}{2}} - 1$
2	$\sum_{k=1}^5 -\cos[(k+1)x] + 4$	[0.2,7.0]	7	1	-1.0
3	$(x-x^2)^2 + (x-1)^2$	[-10,10]	1	1	0.0
4	$(3x-1.4)\sin(18x) + 1.7$	[0.2,7.0]	21	1	-17.582872
5	$2x^2 - 3/100e^{-(200(x-0.0675))^2}$	[-10,10]	1	1	-0.020903
6	$\cos(x) - \sin(5x) + 1$	[0.2,7.0]	6	1	-0.952897
7	$-x - \sin(3x) + 1.6$	[0.2,7.0]	4	1	-6.262872
8	$x + \sin(5x)$	[0.2,7.0]	7	1	-0.077590
9	$-e^{-x}\sin(2\pi x) + 1$	[0.2,7.0]	7	1	0.211315
10	$e^{-x}\sin(2\pi x)$	[0.2,7.0]	7	1	-0.478362
11	$-x + \sin(3x) + 1$	[0.2,7.0]	5	1	-5.815675
12	$x\sin(x) + \sin(10x/3) + \ln(x) - 0.84x + 1.3$	[0.2,7.0]	4	1	-7.047444
13	$\sin(x) + \sin(10x/3) + \ln(x) - 0.84x$	[2.7,7.5]	3	1	-4.601308
14	$\ln(3x)\ln(2x) - 0.1$	[0.2,7.0]	1	1	-0.141100
15	$\sum_{k=0}^5 k\cos[(k+1)x+k] + 12$	[0.2,7.0]	8	1	-0.870885
16	$-\sum_{k=1}^5 k\sin[(k+1)x+k] + 3$	[0.2,7.0]	7	1	-9.031249
17	$\sin^2(1+(x-1)/4) + ((x-1)/4)^2$	[-10,10]	1	1	0.475689
18	$\sqrt{x}\sin^2(x)$	[0.2,7.0]	3	2	0.0
19	$x^2 - \cos(18x)$	[-5,5]	29	1	-1.0
20	e^{x^2}	[-10,10]	1	1	1.0
21	$(x^2/20) - \cos(x) + 2$	[-20,20]	7	1	1.0
22	$\cos(x) + 2\cos(2x)e^{-x}$	[0.2,7.0]	2	1	-0.918397
23	$(x + \sin(x))e^{-x^2}$	[-10,10]	1	1	-0.824239
24	$2\sin(x)e^{-x}$	[0.2,7.0]	2	1	-0.027864
25	$2\cos(x) + \cos(2x) + 5$	[0.2,7.0]	3	2	3.5
26	$e^{\sin(3x)}$	[0.2,7.0]	5	3	0.367879
27	$\sin(x)\cos(x) - 1.5\sin^2(x) + 1.2$	[0.2,7.0]	3	2	-0.451388
28	$\sin(x)$	[0,20]	4	3	-1.0
29	$2(x-3)^2 - e^{x/2} + 5$	[0.2,7.0]	1	1	-0.410315
30	$-e^{\sin(3x)} + 2$	[0.2,7.0]	4	4	-0.718282
31	$-\sum_{i=1}^{10} 1/((k_i(x-a_i))^2 + c_i)$	[0,10]	8	1	-14.592652
32	$\sin(1/x)$	[0.02,1]	8	8	-1.0
33	$-\sum_{k=1}^5 k\sin((k+1)x+k)$	[-10,10]	20	3	-12.031249
34	$(x^2 - 5x + 6)/(x^2 + 1) - 0.5$	[0.2,7.0]	1	1	-0.535534
35	$-\sum_{i=1}^{10} 1/((k_i(x-a_i))^2 + c_i)$	[0,10]	7	1	-13.922345
36	$(x+1)^3/x^2 - 7.1$	[0.2,7.0]	1	1	-0.35
37	$x^4 - 12x^3 + 47x^2 - 60x - 20e^{-x}$	[-1,7]	1	1	-32.781261
38	$x^6 - 15x^4 + 27x^2 + 250$	[-4,4]	2	2	7.0
39	$x^4 - 10x^3 + 35x^2 - 50x + 24$	[-10,20]	2	2	-1.0
40	$24x^4 - 142x^3 + 303x^2 - 276x + 3$	[0,3]	1	1	1.0

Κεφάλαιο 5

Εντροπική μέθοδος ομαλοποίησης για προβλήματα minimax

Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε μία μέθοδο ομαλοποίησης (regularization method) για προβλήματα minimax. Συγκεκριμένα, αξιοποιούμε την αρχή μέγιστης εντροπίας του Jaynes [Phys. Rev., 106:620-630, 1957], για να ομαλοποιήσουμε τη μη διαφορίσιμη αντικειμενική συνάρτηση και στη συνέχεια εφαρμόζουμε τη μέθοδο διακλάδωσης και αποκοπής που έχει ήδη περιγραφεί στο Κεφάλαιο 4. Απώτερος στόχος μας ήταν να δείξουμε ότι το συναρτησιακό της μέγιστης εντροπίας σε συνδυασμό με διαστηματικούς αλγορίθμους μπορεί να εγγυηθεί αξιόπιστα φράγματα για τις βέλτιστες λύσεις ενός προβλήματος minimax. Οι συναρτήσεις εγγλεισμού που αναπτύσσουμε για τη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας μπορούν να διασφαλίσουν εγγυημένα φράγματα που είναι ανεξάρτητα της εντροπικής παραμέτρου p , όπου $p \rightarrow \infty$. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε εργαλεία από τη διαστηματική ανάλυση, προκειμένου να υλοποιήσουμε το συναρτησιακό της εντροπίας. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται σε αυτό το κεφάλαιο έχουν καταγραφεί στις εργασίες [Sot05] και [Sot04].

5.1 Εισαγωγή

Είναι γνωστό ότι υπάρχουν εφαρμογές, σε πολλούς τομείς της επιστήμης, όπου απαιτείται η βελτιστοποίηση μιας μη διαφορίσιμης συνάρτησης. Ένα αντιπροσωπευτικό παράδειγμα αυτής της κλάσης προβλημάτων είναι τα διακριτά προβλήματα minimax. Στόχος αυτού του κεφαλαίου είναι να περιγράψει μια αξιόπιστη μέθοδο επίλυσης προβλημάτων minimax της μορφής

$$\min_{x \in [x]} f(x) \triangleq \max_{1 \leq i \leq m} f_i(x), \quad (5.1.1)$$

όπου $[x] \in \mathbb{IR}^n$ είναι το κοινό πεδίο ορισμού των συναρτήσεων $f_i(x)$, $i = 1, \dots, m$ που συνιστούν την προς ελαχιστοποίηση συνάρτηση

$$f(x) = \max \{f_1(x), \dots, f_m(x)\} \quad (5.1.2)$$

Στόχος μας είναι να βρούμε το ολικό ελάχιστο f^* καθώς και το σύνολο $\mathcal{X}^* = \{x^* \in [x] : f(x^*) = f^*\}$ όλων των ολικών ελαχιστοποιητών της f . Θεωρούμε ότι οι συναρτήσεις f_i

είναι δύο φορές παραγωγίσιμες. Ωστόσο, παρατηρούμε ότι λόγω του $\max$ η αντικειμενική συνάρτηση (5.1.2) έχει ασυνεχείς πρώτες παραγώγους στα σημεία όπου δύο ή περισσότερες συναρτήσεις $f_i(x)$ είναι ίσες με $f(x)$ ακόμα και αν κάθε $f_i(x)$ ($i = 1, \dots, m$) έχει συνεχείς παραγώγους πρώτης τάξης. Για την βελτιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης (5.1.2), έχουν προταθεί στην πρόσφατη βιβλιογραφία μέθοδοι, οι οποίες βασίζονται στην ιδέα της ομαλοποίησης της αντικειμενικής συνάρτησης (smoothing algorithms) [PGL93, GG90, PMH91, Pol88, Var92, Zan80]. Μεταξύ αυτών, έχει αναπτυχθεί μια κλάση μεθόδων η οποία προσεγγίζει την συνάρτηση $\max$ στην (5.1.2) με διαφορίσιμες (ομαλές) συναρτήσεις [Ber89, CC78, GG90, Li87, Pol88, Zan80]. Ωστόσο, το μειονέκτημα αυτών των μεθόδων είναι ότι απαιτούνται αλγόριθμοι για τη ρύθμιση παραμέτρων προκειμένου να διασφαλιστεί η σύγκλισή τους.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε μία μέθοδο ομαλοποίησης της μη διαφορίσιμης αντικειμενικής συνάρτησης (5.1.2) προκειμένου να εφαρμόσουμε το διαστηματικό αλγόριθμο που περιγράψαμε στο Κεφάλαιο 4. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε εργαλεία από τη διαστηματική ανάλυση, προκειμένου να υλοποιήσουμε το συναρτησιακό της εντροπίας. Για το σκοπό αυτό εκμεταλλευόμαστε τη μέγιστη εντροπία του Jaynes [Jay57]. Με χρήση διαστηματικής αριθμητικής κατασκευάζουμε κατάλληλες συναρτήσεις εγγλεισμού οι οποίες ικανοποιούν τις προϋποθέσεις που απαιτούνται από τη θεωρία προκειμένου η ομαλή συνάρτηση να προσεγγίζει την αντικειμενική, με αυθαίρετη ακρίβεια. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα δείχνουν ότι, ο προτεινόμενος αλγόριθμος, εγγυάται αξιόπιστα φράγματα (αυθαίρετα μικρού πλάτους) τόσο για το ολικό ελάχιστο, όσο και για όλους τους ολικούς ελαχιστοποιητές.

5.2 Γενικές μέθοδοι ομαλοποίησης για προβλήματα minimax

Είναι γνωστό ότι το minimax πρόβλημα (5.1.1) έχει την ακόλουθη συνάρτηση Lagrange:

$$L(x, \lambda) = \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x), \quad (5.2.1)$$

για κάθε $x \in [x]$, όπου λ το m -διάστατο διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange. Οι πολλαπλασιαστές λ_i είναι μη αρνητικοί αριθμοί και το άθροισμα τους είναι ίσο με τη μονάδα. Επομένως, μπορούμε να πούμε ότι βρίσκονται εντός του μοναδιαίου απλόκου

$$\Sigma_m \triangleq \left\{ \lambda \in \mathbb{R}^m \mid \lambda_i \geq 0, i \in \{1, \dots, m\}, \sum_{i=1}^m \lambda_i = 1 \right\}. \quad (5.2.2)$$

Έτσι, η συνάρτηση $f(x)$ μπορεί να προκύψει αν μεγιστοποιήσουμε την συνάρτηση (5.2.1) πάνω στο άπλοκο Σ_m για κάθε $x \in [x]$, δηλαδή,

$$f(x) = \max_{\lambda \in \Sigma_m} L(x, \lambda), \quad \text{για κάθε } x \in [x]. \quad (5.2.3)$$

Δυστυχώς όμως, η μεγιστοποίηση της $\sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x)$ πάνω στο $\lambda \in \Sigma_m$ έχει σπάνια μια αναλυτική λύση $\lambda(x)$ για όλα τα $x \in [x]$. Γι αυτό το λόγο, οι γενικές μέθοδοι ομαλοποίησης αντικαθιστούν τη συνάρτηση (5.2.1) με την ακόλουθη:

$$L_p(x, \lambda) = \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) + \frac{1}{p} R(\lambda; \beta) \quad (5.2.4)$$

όπου $p > 0$ είναι μια παράμετρος ελέγχου, R μια συνάρτηση ομαλοποίησης και β ένα προαίρετικό διάνυσμα παραμέτρων της R . Επομένως, το πρόβλημα ανάγεται στην επιλογή της πιο κατάλληλης συνάρτησης $R(\lambda; \beta)$, έτσι ώστε η μεγιστοποίηση της $L_p(x, \lambda)$ να έχει ως αποτέλεσμα μια προσεγγιστική συνάρτηση $f_p(x)$, η οποία θα είναι ομαλή, δηλαδή,

$$f_p(x) = \max_{\lambda \in \Sigma_m} L_p(x, \lambda). \quad (5.2.5)$$

Κάποιες ήδη γνωστές μέθοδοι ομαλοποίησης έχουν χρησιμοποιήσει τις ακόλουθες συναρτήσεις $R(\lambda; \beta)$:

- Οι Gigola και Gomez στην εργασία τους [GG90] έχουν προτείνει τη συνάρτηση ομαλοποίησης

$$R(\lambda; \beta) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (\lambda_i - \beta_i)^2.$$

- Οι Hiriart-Urruty και Lemarechal [HUL93] έχουν προτείνει τη συνάρτηση ομαλοποίησης

$$R(\lambda; \beta) = \sum_{i=1}^m \ln \lambda_i,$$

με την παρατήρηση ότι, στην προκειμένη περίπτωση, η συνάρτηση R δεν εξαρτάται από το διάνυσμα παραμέτρων β .

Ωστόσο, σε καμία από αυτές τις εργασίες δεν έχει δοθεί αναλυτική έκφραση για την συνάρτηση $f_p(x)$, όταν $x \in [x]$. Στη συνέχεια θα δούμε ότι το συναρτησιακό της μέγιστης εντροπίας μας επιτρέπει να παράγουμε μια ομαλή συνάρτηση $f_p(x)$, η οποία δίνεται σε κλειστή μορφή και μπορεί να προσεγγίσει τη συνάρτηση (5.2.3) με αυθαίρετη ακρίβεια.

5.3 Η εντροπική μέθοδος ομαλοποίησης

Δοθέντος $x \in [x]$, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση εντροπίας του Jaynes¹ [Jay57] ως συνάρτηση ομαλοποίησης,

$$R(\lambda) = - \sum_{i=1}^m \lambda_i \ln \lambda_i,$$

ορίζουμε την

$$L_p(x, \lambda) \equiv \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^m \lambda_i \ln \lambda_i, \quad \text{όπου } \lambda \in \Sigma_m. \quad (5.3.1)$$

Εφόσον η $L_p(x, \lambda)$ είναι αυστηρά κοίλη ως προς λ , μεγιστοποιώντας την πάνω στο μοναδιαίο άπλοχο Σ_m , παίρνουμε τη μοναδική βέλτιστη λύση:

$$\lambda_i^*(x, p) = \frac{\exp[p f_i(x)]}{Z} \quad (5.3.2)$$

όπου

$$Z = \sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x)], \quad 1 \leq i \leq m. \quad (5.3.3)$$

¹Αδημοσίευτες εργασίες του Prof. Edwin Thompson Jaynes (1922-1998) είναι διαθέσιμες στην ιστοσελίδα: <http://bayes.wustl.edu/etj/etj.html>

Αντικαθιστώντας τους πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i με τον ολικό μεγιστοποιητή $\lambda_i^*(x, p)$ παίρνουμε την παρακάτω αναλυτική έκφραση για τη ζητούμενη συνάρτηση ομαλοποίησης

$$f_p(x) = \frac{1}{p} \cdot \ln \left\{ \sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x)] \right\} \quad (5.3.4)$$

η οποία είναι μια ομαλή συνάρτηση και είναι όντως το μέγιστο της $L_p(x, \lambda)$ επί του μοναδιαίου απλόκου Σ_m , για κάθε $x \in [x]$.

Το κίνητρο για να ορίσουμε τη συνάρτηση $L_p(x, \lambda)$ μέσω της εξίσωσης

$$L_p(x, \lambda) \equiv \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x) - \frac{1}{p} \sum_{i=1}^m \lambda_i \ln \lambda_i, \quad (5.3.5)$$

ήταν να βρούμε το βέλτιστο συνδυασμό των $\lambda_i f_i(x)$ πάνω στο μοναδιαίο απλόκο Σ_m , έτσι ώστε $f(x) = \max_{1 \leq i \leq m} f_i(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i f_i(x)$.

Όταν η παράμετρος p είναι επαρκώς μικρή, ο όρος της εντροπίας επικρατεί στη συνάρτηση $L_p(x, \lambda)$. Σε αυτή την περίπτωση, όλοι οι πολλαπλασιαστές τείνουν να γίνουν ίσοι και λαμβάνουν τιμές στο βαρύκεντρο του απλόκου Σ_m . Αντιθέτως, καθώς η τιμή του p αυξάνεται, η λύση μετατοπίζεται σταδιακά προς το σύνορο του απλόκου Σ_m έτσι ώστε να έχουμε τον καλύτερο γραμμικό συνδυασμό των $f_i(x)$, $i = 1, \dots, m$. Επομένως, η παράμετρος p μπορεί να θεωρηθεί ως μια ομοτοπική παράμετρος (homotopy parameter) η οποία συνδέει το πρόβλημα της μέγιστης εντροπίας, του οποίου η λύση είναι γνωστή $\lambda_i = 1/m$, $i = 1, \dots, m$, με το πρόβλημα $\max_{\lambda \in \Sigma_m} L_p(x, \lambda)$.

Στη συνέχεια παραθέτουμε βασικούς ορισμούς και έννοιες, οι οποίες χρειάζονται για την ανάπτυξη των συναρτήσεων εγγλεισμού της συνάρτησης ομαλοποίησης.

Ορισμός 5.3.1 Έστω p θετικός πραγματικός αριθμός και έστω $f_i : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$ οι δοσμένες συναρτήσεις. Η συνάρτηση μεγίστης εντροπίας $f_p : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ των $f_1, \dots, f_m$ ορίζεται ως

$$f_p(x) = \frac{1}{p} \cdot \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p \cdot f_i(x)) \right) \quad (5.3.6)$$

Το ακόλουθο λήμμα δηλώνει ότι είναι εφικτό να προσεγγίσουμε την αντικειμενική συνάρτηση $f(x)$ με αυθαίρετη ακρίβεια, χρησιμοποιώντας την (5.3.6) ως μία ομαλή συνάρτηση.

Λήμμα 5.3.1 Για κάθε $\varepsilon > 0$, $\exists p_\varepsilon > 0$ τέτοιο ώστε $|f_p(x) - f(x)| < \varepsilon$, $\forall p > p_\varepsilon$.

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} f_p(x) - f(x) &= \frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p \cdot f_i(x)) \right) - \frac{1}{p} \ln (\exp(p \cdot f(x))) \\ &= \frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p (f_i(x) - f(x))) \right). \end{aligned} \quad (5.3.7)$$

Από τον ορισμό της $f(x)$, έχουμε ότι $f_i(x) - f(x) \leq 0$, $i = 1, 2, \dots, m$ και επιπλέον υπάρχει τουλάχιστον ένα $j \in \{1, 2, \dots, m\}$ τέτοιο ώστε $f_j(x) - f(x) = 0$. Επομένως, το

άθροισμα των εκθετικών όρων στην (5.3.7) είναι μεταξύ 1 and m . Έτσι, καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι

$$0 \leq f_p(x) - f(x) \leq \frac{\ln(m)}{p} \quad (5.3.8)$$

και ο ισχυρισμός μας επιτυγχάνεται με $p_\varepsilon = \ln(m)/\varepsilon$. ■

Λήμμα 5.3.2 Για κάθε $p > 0$, έχουμε ότι

$$f_p(x) - \frac{\ln(m)}{p} \leq f(x) \leq f_p(x). \quad (5.3.9)$$

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι άμεση συνέπεια της ανίσωσης (5.3.8). ■

Λήμμα 5.3.3 Η συνάρτηση $f_p(x)$ συγκλίνει ομοιόμορφα στην $f(x)$ όταν $x \in [x]$, καθώς το p τείνει στο άπειρο.

Απόδειξη. Από την ανίσωση (5.3.8) έχουμε ότι για κάθε $p > 0$, ισχύει

$$f(x) \leq f_p(x) \leq f(x) + \frac{\ln(m)}{p} \quad (5.3.10)$$

Επομένως, η $f_p(x)$ συγκλίνει ομοιόμορφα στην $f(x)$, καθώς η παράμετρος $p \rightarrow \infty$. ■

Λήμμα 5.3.4 Η συνάρτηση $f_p(x)$ είναι κυρτή εάν κάθε συνάρτηση $f_i(x)$, $i = 1, \dots, m$ είναι κυρτή, ορισμένη στο κυρτό χωρίο $[x]$.

Απόδειξη. Για κάθε $x_1, x_2 \in [x]$ και $\kappa \in (0, 1)$, έχουμε

$$\begin{aligned} f_p(\kappa x_1 + (1 - \kappa)x_2) &= \frac{1}{p} \ln \sum_{i=1}^m \exp[p f_i(\kappa x_1 + (1 - \kappa)x_2)] \\ &\leq \frac{1}{p} \ln \sum_{i=1}^m \exp[\kappa p f_i(x_1) + (1 - \kappa)p f_i(x_2)] \\ &= \frac{1}{p} \ln \sum_{i=1}^m (\exp[p f_i(x_1)])^\kappa \cdot (\exp[p f_i(x_2)])^{1-\kappa} \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την ανισότητα του Holder έχουμε

$$\sum_{i=1}^m (\exp[p f_i(x_1)])^\kappa \cdot (\exp[p f_i(x_2)])^{1-\kappa} \leq \left(\sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x_1)] \right)^\kappa \cdot \left(\sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x_2)] \right)^{1-\kappa}.$$

Κατά συνέπεια,

$$\begin{aligned} f_p(\kappa x_1 + (1 - \kappa)x_2) &= \frac{\kappa}{p} \ln \sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x_1)] + \frac{1 - \kappa}{p} \ln \sum_{i=1}^m \exp[p f_i(x_2)] \\ &= \kappa f_p(x_1) + (1 - \kappa)f_p(x_2), \end{aligned}$$

από όπου συμπεραίνουμε ότι η συνάρτηση $f_p(x)$ είναι κυρτή στο $[x]$. ■

Η κλίση της συνάρτησης προκύπτει πολύ εύκολα και δίνεται από τον τύπο

$$\nabla f_p(x) = J(x)\lambda, \quad (5.3.11)$$

ενώ η Εσσιανή είναι

$$\nabla^2 f_p(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla^2 f_i(x) + p J(x) (\Gamma - \lambda \lambda^T) J(x)^T, \quad (5.3.12)$$

όπου $J(x)$ είναι ο Ιακωβιανός πίνακας $[\partial f_i / \partial x_j]$, λ είναι ένα m -διάστατο διάνυσμα με στοιχεία

$$\lambda_i = \exp[p f_i(x)] \cdot \left(\sum_{\ell=1}^m \exp[p f_\ell(x)] \right)^{-1}, \quad (5.3.13)$$

και $\Gamma = \text{diag}(\lambda_i)$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας.

Είναι προφανές ότι $\lambda \in \Sigma_m$, εντούτοις, οι όροι $\exp(p \cdot f_i(x))$ παίρνουν πολύ μεγάλες τιμές καθώς το p πλησιάζει στο ∞ . Κάτι που σίγουρα θα δημιουργήσει προβλήματα κατά τους υπολογισμούς λόγω υπερχείλισης. Για να αποτρέψουμε την υπερχείλιση, ξαναγράφουμε τα λ_i ως ακολούθως

$$\lambda_i = \exp[p(f_i(x) - f(x))] \cdot \left(\sum_{\ell=1}^m \exp[p(f_\ell(x) - f(x))] \right)^{-1}. \quad (5.3.14)$$

Συμβολίζουμε με $\mathcal{I}(x) = \{i \in \{1, \dots, m\} : f_i(x) = \max_{i \in \{1, \dots, m\}} f_i(x)\}$ το ενεργό σύνολο δεικτών. Τότε έχουμε ότι

$$\exp(p(f_i(x) - f(x))) \equiv 1, \text{ για κάθε } i \in \mathcal{I}(x), \quad (5.3.15)$$

και

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \exp(p(f_i(x) - f(x))) \equiv 0, \text{ για κάθε } i \notin \mathcal{I}(x). \quad (5.3.16)$$

Στο ακόλουθο θεώρημα δίνουμε μια συνθήκη αριστότητας με χρήση πρώτης τάξης πληροφορία για το minimax πρόβλημα (5.1.1) συναρτήσει των εντροπικών πολλαπλασιαστών λ_i .

Θεώρημα 5.3.1 Έστω ότι οι συναρτήσεις $f_i : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{1, \dots, m\}$, είναι συνεχώς διαφορίσιμες. Αν x^* είναι ένας τοπικός ελαχιστοποιητής της $f(x)$, τότε οι σχετιζόμενοι πολλαπλασιαστές $\lambda^* \in \Sigma_m$ που ορίζονται από την (5.3.14) ικανοποιούν τις συνθήκες

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* f'_i(x^*) = 0 \quad (5.3.17)$$

και

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^* (f(x^*) - f_i(x^*)) = 0. \quad (5.3.18)$$

Απόδειξη. Εφόσον το x^* είναι ένας τοπικός ελαχιστοποιητής της $f(x)$, λόγω του Λήμματος 5.3.3, θα είναι επίσης ένας τοπικός ελαχιστοποιητής της $f_p(x)$, από όπου επαληθεύεται η συνθήκη (5.3.17). Για την απόδειξη της συνθήκης (5.3.18), παρατηρούμε ότι $f(x^*) - f_i(x^*) = 0$ για όλα τα $i \in \mathcal{I}(x^*)$, ενώ $\lambda_i^* = 0$ για όλα τα $i \notin \mathcal{I}(x^*)$. ■

Παρατήρηση. Προφανώς, μπορούμε να θεωρήσουμε για το πρόβλημα (5.1.1) τη συνάρτηση Lagrange $L : \mathbb{R} \times \Sigma_m \rightarrow \mathbb{R}$, η οποία ορίζεται ως

$$L(x, \mu) = \sum_{i=1}^m \mu_i f_i(x).$$

Παρατηρούμε ότι, αν το x^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής, τότε, λόγω της (5.3.18), $L(x^*, \lambda^*) = f(x^*)$. Επιπλέον, $L(x, \lambda^*) = f(x)$ για κάθε $x \in \mathbb{R}$, διότι $\lambda_i^* = 0$ για κάθε $i \notin \mathcal{I}(x^*)$ και $\sum_{i=1}^m \lambda_i^* = 1$. Έτσι, το x^* πρέπει να είναι επίσης και ένας τοπικός ελαχιστοποιητής του περιορισμού της $L(\cdot, \lambda^*)$ στο $\mathbb{R}$.

5.4 Συναρτήσεις εγκλεισμού της μέγιστης εντροπίας

Σε αυτή την ενότητα θα δώσουμε τις συναρτήσεις εγκλεισμού για τη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας όπως δόθηκε στον Ορισμό 5.3.6. Απώτερος στόχος μας είναι η παραγωγή κλειστών τύπων, έτσι ώστε να μπορούν να υλοποιηθούν σε οποιαδήποτε γλώσσα προγραμματισμού με την βοήθεια διαστηματικής αριθμητικής.

5.4.1 Προσδιορισμός συνάρτησης εγκλεισμού της f_p

Αρχικά, θα κατασκευάσουμε τη φυσική διαστηματική επέκταση της f_p . Αυτό μπορεί να γίνει πολύ απλά αντικαθιστώντας τη μεταβλητή x , στον ορισμό της f_p , με το αντίστοιχο διάστημα $[x]$ απ' όπου παίρνει τιμές. Δηλαδή,

$$F_p([x]) = \frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p \cdot F_i([x])) \right). \quad (5.4.1)$$

Επειδή όμως οι συναρτήσεις $\exp : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ και $\ln : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ είναι γνησίως αύξουσες, η (5.4.1) μπορεί να γραφεί ως

$$F_p([x]) = \left[\frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p u_i) \right), \frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp(p v_i) \right) \right] \quad (5.4.2)$$

όπου $u_i = \inf F_i([x])$, $v_i = \sup F_i([x])$ και $F_i : \mathbb{IR} \rightarrow \mathbb{IR}$ είναι η διαστηματική επέκταση των $f_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{1, \dots, m\}$.

Δυστυχώς όμως, η διαστηματική επέκταση (5.4.2) δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην πράξη. Οποιαδήποτε προσπάθεια να υπολογίσει κανείς το άνω ή το κάτω φράγμα της (5.4.2) θα οδηγούσε αμέσως σε προβλήματα υπερχείλισης ή υποχείλισης αντίστοιχα, καθώς το p τείνει στο ∞ . Πρέπει να σημειωθεί ότι πολλοί ερευνητές έχουν προσπαθήσει να αναπτύξουν αλγορίθμους για τη δυναμική ρύθμιση της παραμέτρου p έτσι ώστε να αποφευχθεί οποιοδήποτε τέτοιον είδους πρόβλημα. Ωστόσο, μια τέτοια προσέγγιση καθιστά την μέθοδο ευρετική (heuristic) και επομένως δεν θα μπορούσαμε να εγγυηθούμε ασφαλή φράγματα για τις λύσεις του minimax προβλήματος.

Στη συνέχεια θα περιγράψουμε μια διαδικασία προκειμένου να αποφευχθεί οποιοδήποτε πρόβλημα κατά τους υπολογισμούς, όταν η παράμετρος p είναι στατική και παίρνει οσοδήποτε μεγάλες τιμές, π.χ. $p = 10^{+308}$.

Στην απόδειξη του Λήμματος 5.3.1 δείξαμε ότι η συνάρτηση f_p γράφεται

$$f_p(x) = f(x) + \frac{1}{p} \ln \left(\sum_{i=1}^m \exp[p(f_i(x) - f(x))] \right). \quad (5.4.3)$$

Αν θέσουμε

$$u_j = \max_{1 \leq i \leq m} \{u_i\}, \quad \text{όπου} \quad u_i = \inf F_i([x]),$$

και

$$v_k = \max_{1 \leq i \leq m} \{v_i\}, \quad \text{όπου} \quad v_i = \sup F_i([x])$$

τότε, με χρήση της (5.4.3) μπορούμε να ορίσουμε τα ακόλουθα συναρτησιακά

$$\phi(u) = u_j + \frac{1}{p} \ln \left(1 + \sum_{i \neq j}^m \exp(p(u_i - u_j)) \right), \quad (5.4.4)$$

και

$$\phi(v) = v_k + \frac{1}{p} \ln \left(1 + \sum_{i \neq k}^m \exp(p(v_i - v_k)) \right). \quad (5.4.5)$$

Επομένως, μπορούμε να ξαναγράψουμε την (5.4.2) συναρτήσεων των $\phi(u)$ και $\phi(v)$ ως ακόλουθως:

$$F_p([x]) = [\phi(u), \phi(v)], \quad (5.4.6)$$

ή ισοδύναμα,

$$F_p([x]) = [u_j, v_k] + \frac{1}{p} \cdot [\tilde{e}_j, \tilde{e}_k], \quad (5.4.7)$$

όπου

$$\begin{aligned} \tilde{e}_j &= \ln \left(1 + \sum_{i \neq j}^m \exp[p(u_i - u_j)] \right), \\ \tilde{e}_k &= \ln \left(1 + \sum_{i \neq k}^m \exp[p(v_i - v_k)] \right) \end{aligned}$$

και

$$0 \leq \tilde{e}_j \leq \tilde{e}_k \leq \ln(m).$$

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι για αρκετά μεγάλες τιμές του p , ο όρος $\frac{1}{p} [\tilde{e}_j, \tilde{e}_k]$ στην (5.4.6) τείνει στο μηδέν. Οπότε θα ήταν λογικό κάποιος να ισχυριστεί ότι δεν χρειάζεται να υπολογίσει το άνω και κάτω φράγμα του διαστήματος $[\tilde{e}_j, \tilde{e}_k]$ στην (5.4.6), όπου και δημιουργείται το πρόβλημα κατά τους αριθμητικούς υπολογισμούς. Ωστόσο, μπορούμε να διαχειριστούμε τα τυχόν προβλήματα κατά τους υπολογισμούς αν φροντίσουμε να εξετάσουμε τις ακόλουθες δύο περιπτώσεις:

1. Σε περίπτωση που κατά τον υπολογισμό του $\tilde{e}_j$ για κάποιο i συμβεί

$$p(u_i - u_j) < \ln(\text{MinMachineNumber}) < 0,$$

τότε αν επιχειρήσουμε να υπολογίσουμε τον εκθετικό όρο $\exp(p(u_i - u_j))$ οδηγούμαστε σε υποχειλίση. Προκειμένου να αποφευχθεί το πρόβλημα αυτό, παραλείπουμε τον εκθετικό όρο $\exp(p(u_i - u_j))$ κατά τον υπολογισμό του $\phi(u)$.

2. Σε περίπτωση που κατά τον υπολογισμό του $\tilde{e}_k$ για κάποιο i συμβεί

$$p(v_i - v_k) < \ln(\text{MinMachineNumber}) < 0,$$

τότε αν επιχειρήσουμε να υπολογίσουμε τον εκθετικό όρο $\exp(p(v_i - v_k))$ οδηγούμαστε σε υποχειλίση. Σε αυτή την περίπτωση ο όρος αυτός αντικαθίσταται από το μικρότερο θετικό αριθμό μηχανής $\text{MinMachineNumber} > 0$.

Παρατήρηση. Η παράμετρος MinMachineNumber είναι ο μικρότερος θετικός αριθμός κινητής υποδιαστολής ο οποίος μπορεί να αναπαρασταθεί σε ένα υπολογιστικό σύστημα, $\text{MinMachineNumber} = 2.22507 \times 10^{-308}$. Επομένως, η τυπική τιμή του $\ln(\text{MinMachineNumber})$ είναι -708.396 .

5.4.2 Προσδιορισμός συνάρτησης εγκλεισμού της f'_p

Σε αυτή την ενότητα, δίνουμε τον τρόπο κατασκευής της διαστηματικής επέκτασης $F'_p : \mathbb{IR} \rightarrow \mathbb{IR}$ της f'_p . Αν θεωρήσουμε τη φυσική διαστηματική επέκταση της $f'_p(x)$ στο διάστημα $[x]$, τότε, από τη σχέση (5.3.11), έχουμε ότι

$$F'_p([x]) = \sum_{i=1}^m [\lambda]_i F'_i([x]), \quad (5.4.8)$$

όπου $F'_i : \mathbb{IR} \rightarrow \mathbb{IR}$ είναι μια διαστηματική επέκταση της $f'_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in \{1, \dots, m\}$. Σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε τα διαστήματα $[\lambda]_i$, έτσι ώστε $[\lambda]_i \subseteq [0, 1]$. Από την (5.3.13) είναι εύκολο να δείξουμε ότι, οι πολλαπλασιαστές λ_i μπορούν να γραφούν ως ακολούθως:

$$\lambda_i = \left(1 + \sum_{\ell \neq i} \exp[p(f_\ell(x) - f_i(x))] \right)^{-1} \quad (5.4.9)$$

Θεωρώντας τη φυσική διαστηματική επέκταση των λ_i πάνω στο $[x]$, παίρνουμε

$$[\lambda]_i = \left(1 + \sum_{\ell \neq i} \exp[p(F_\ell([x]) - F_i([x]))] \right)^{-1} \quad (5.4.10)$$

Επειδή η συνάρτηση $\exp : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι γνησίως αύξουσα, μπορούμε να εκφράσουμε τα Λ_i ως ακολούθως:

$$[\lambda]_i = \left[1 + \sum_{\ell \neq i} u_\ell, 1 + \sum_{\ell \neq i} v_\ell \right]^{-1} = \left[1 + \sum_{\ell \neq i} v_\ell, 1 + \sum_{\ell \neq i} u_\ell \right] \quad (5.4.11)$$

όπου,

$$u_\ell = \exp[p \cdot \inf(F_\ell([x]) - F_i([x]))]$$

και

$$v_\ell = \exp[p \cdot \sup(F_\ell([x]) - F_i([x]))].$$

Σε αυτό το σημείο, παρατηρούμε ότι κατά τον υπολογισμό των πολλαπλασιαστών $[\lambda]_i$ είναι αναμενόμενο να αντιμετωπίσουμε πρόβληματα υπερχείλισης και υποχειλίσης κατά τον υπολογισμό των όρων u_ℓ και v_ℓ . Κάνοντας μια εμπεριστατωμένη μελέτη της (5.4.11) μπορούμε να διακρίνουμε τις ακόλουθες τέσσερις περιπτώσεις:

1. Αν κατά τον υπολογισμό κάποιου όρου v_ℓ όπου $\ell \in \{1, \dots, m\}$ και $\ell \neq i$ συμβεί

$$p \cdot \sup (F_\ell([x]) - F_i([x])) < \ln(\text{MinMachineNumber}) < 0,$$

τότε είναι αναμενόμενο να έχουμε πρόβλημα υποχειρίσιμης κατά τον υπολογισμό λόγω του $\exp [p \cdot \sup (F_\ell([x]) - F_i([x]))]$, σε αυτή την περίπτωση ο όρος v_ℓ αντικαθίσταται από το μικρότερο θετικό αριθμό μηχανής MinMachineNumber .

2. Αν για κάποιο όρο v_ℓ όπου $\ell \in \{1, \dots, m\}$ και $\ell \neq i$ συμβεί

$$p \cdot \sup (F_\ell([x]) - F_i([x])) > \ln(\text{MaxMachineNumber}) > 0,$$

τότε ο υπολογισμός του $\exp (p \cdot \sup (F_\ell([x]) - F_i([x])))$ θα οδηγήσει σε υπερχείλιση. Σε αυτή την περίπτωση θέτουμε ως κάτω φράγμα του πολλαπλασιαστική Λ_i το μηδέν, δηλαδή, $\inf(\Lambda_i) = 0$.

3. Αν για κάποιο όρο u_ℓ όπου $\ell \in \{1, \dots, m\}$ και $\ell \neq i$ συμβεί

$$p \cdot \inf (F_\ell([x]) - F_i([x])) < \ln(\text{MinMachineNumber}) < 0,$$

τότε ο υπολογισμός του $\exp (p \cdot \inf (F_\ell([x]) - F_i([x])))$ θα οδηγήσει σε υποχειρίσιμη. Σε αυτή την περίπτωση, ο όρος u_ℓ αντικαθίσταται με το μηδέν.

4. Αν για κάποιο όρο u_ℓ όπου $\ell \in \{1, \dots, m\}$ και $\ell \neq i$ συμβεί

$$p \cdot \inf \{F_\ell([x]) - F_i([x])\} > \ln(\text{MaxMachineNumber}) > 0,$$

τότε ο υπολογισμός του $\exp (p \cdot \inf (F_\ell([x]) - F_i([x])))$ θα οδηγήσει σε υπερχείλιση. Σε αυτή την περίπτωση θέτουμε ως άνω φράγμα του πολλαπλασιαστική Λ_i ίσο με το μικρότερο θετικό αριθμό της μηχανής. Δηλαδή, $\sup(\Lambda_i) = \text{MinMachineNumber}$.

Παρατήρηση. Η παράμετρος MaxMachineNumber εξαρτάται από την μηχανή που χρησιμοποιούμε και συνήθως είναι 2^k , όπου k είναι ο μεγαλύτερος εκθέτης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εσωτερική αναπαράσταση των αριθμών κινητής υποδιαστολής, σε μια τυπική μηχανή έχουμε ότι $k = 1024$. Επομένως, $\text{MaxMachineNumber} = 1.79769 \times 10^{+308}$, απ' όπου έχουμε ότι $\ln(\text{MaxMachineNumber}) = 709.783$

Οι παραπάνω κανόνες (1)–(4) έχουν συμπεριληφθεί στον ίδιο διαχειριστή λαθών μαζί με τους κανόνες που περιγράψαμε στην Ενότητα 5.4.1. Η υλοποίηση του διαχειριστή λαθών έχει γίνει σε C++ ενώ οι απαιτούμενες παράμετροι MaxMachineNumber , MinMachineNumber προσδιορίζονται αυτόματα από τον διαχειριστή λαθών.

Εφόσον είναι διαθέσιμο ένα διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου f'_p , μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μορφή μέσης τιμής προκειμένου να πάρουμε καλύτερα φράγματα για το πεδίο τιμών της συνάρτησης f_p ,

$$F_{\text{MVF}}([x], c) = f_p(c) + F'_p([x]) \cdot ([x] - c) \quad (5.4.12)$$

όπου το διάστημα εγκλεισμού της παραγώγου υπολογίζεται από τη σχέση (5.4.8), ενώ όπου c μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε είτε το βέλτιστο κέντρο c^- είτε το μέσο του διαστήματος, $m([x])$, όπως συνηθίζεται. Ασφαλώς, για να επιτύχουμε καλύτερα φράγματα, επιβάλλεται ο υπολογισμός της τομής, $F_{\text{MVF}}([x], c) \cap F_p([x])$, των διαστημάτων εγκλεισμού που προέρχονται από την μορφή μέσης τιμής και τη φυσική επέκταση της f_p όπως δίνεται από τη σχέση (5.4.7).

5.5 Αλγόριθμος διακλάδωσης & αποκοπής για προβλήματα minimax

Εφόσον η συνάρτηση f_p είναι πλέον διαφορίσιμη και προσεγγίζει με οσοδήποτε μεγάλη ακρίβεια την αντικειμενική συνάρτηση $f(x) = \max \{f_1(x), \dots, f_m(x)\}$ μπορούμε να εφαρμόσουμε τον Αλγόριθμο 4.5 του Κεφαλαίου 4 για την ελαχιστοποίηση της μη διαφορίσιμης αντικειμενικής συνάρτησης. Σκοπός μας είναι να αποτιμήσουμε τη διαδικασία επιτάχυνσης που περιγράψαμε στο Αλγόριθμο 4.3, δηλαδή, τα γραμμικά βήματα αποκοπής. Ο Αλγόριθμος 5.1, που παραθέτουμε στη συνέχεια είναι πανομοιότυπος με τον Αλγόριθμο 4.3 εκτός από την διαδικασία επιλογής του κέντρου c (Βήμα 2 και 18).

Αλγόριθμος 5.1 Εντροπικός Αλγόριθμος Διακλάδωσης και Αποκοπής.

```

MaxEntBranchAndPrune( $f_p, [x], \epsilon, F^*, \mathcal{L}^*$ )

1:  $\mathcal{L} = \{\}$ ;  $\mathcal{L}^* = \{\}$ ;
2:  $c = \text{mid}(X)$ ;
3:  $\tilde{f} := \min\{\sup F_p(\underline{x}), \sup F_p(\overline{x}), \sup F_p(c)\}$ ;
4: if  $\tilde{f} \geq \sup F_p(\underline{x})$  then
5:    $\mathcal{L}^* := \mathcal{L}^* \uplus ([\underline{x}, \underline{x}], \inf F_p(\underline{x}))$ ;
6: if  $\tilde{f} \geq \sup F_p(\overline{x})$  then
7:    $\mathcal{L}^* := \mathcal{L}^* \uplus ([\overline{x}, \overline{x}], \inf F_p(\overline{x}))$ ;
8: OuterPrune( $[x], \inf F_p(\underline{x}), \inf F_p(\overline{x}), F'_p([x]), \tilde{f}$ );
9:  $\hat{f} := \tilde{f}$ ;
10:  $F_{[x]} := (F_p(c) + F'_p([x]) ([x] - c)) \cap F_p([x])$ ;
11:  $\mathcal{L} := \mathcal{L} \uplus ([x], \inf F_{[x]}, F'_p([x]), c, F_p(c), \hat{f})$ ;
12: while  $\mathcal{L} \neq \{\}$  do
13:    $([y], \inf F_{[y]}, F'_p([y]), c, F_p(c), \hat{f}) := \text{PopHead}(\mathcal{L})$ ;
14:   Prune( $[y], c, F_p(c), F'_p([y]), \tilde{f}, \hat{f}, [y]_1, [y]_2$ );
15:   for  $i := 1$  to 2 do
16:     if  $Y_i = \emptyset$  then next  $i$ ;
17:     if  $0 \notin F'_p(Y_i)$  then next  $i$ ;
18:      $c = \text{mid}(Y_i)$ ;
19:     if  $\sup F_p(c) < \tilde{f}$  then
20:        $\tilde{f} := \sup F_p(c)$ ;
21:       CutOffTest( $\mathcal{L}, \tilde{f}$ );
22:        $F_{[y]} := (F_p(c) + F'_p([y]_i) ([y]_i - c)) \cap F_p([y]_i)$ ;
23:       if  $\inf F_{[y]} \leq \tilde{f}$  then
24:         if  $w_{\text{rel}}([y]_i) \leq \epsilon$  then
25:            $\mathcal{L}^* := \mathcal{L}^* \uplus ([y]_i, \inf F_{[y]})$ ;
26:         else
27:            $\mathcal{L} := \mathcal{L} \uplus ([y]_i, \inf F_{[y]}, F'_p([y]_i), c, F_p(c), \hat{f})$ ;
28:       end for
29: end while
30:  $(Y, \inf F_{[y]}) := \text{Head}(\mathcal{L}^*)$ ;  $F_p^* = [\inf F_{[y]}, \tilde{f}]$ ;
31: CutOffTest( $\mathcal{L}^*, \tilde{f}$ );
32: return  $F_p^*, \mathcal{L}^*$ ;

```

Ο Αλγόριθμος 5.1 λαμβάνει ως είσοδο την εντροπική αντικειμενική συνάρτηση f_p , το αρχικό διάστημα αναζήτησης $[x]$ και την ακρίβεια ϵ , και επιστρέφει ένα διάστημα εγκλεισμού $[f^*]$ για το ολικό ελάχιστο f^* , καθώς επίσης και μία λίστα L^* αποτελεσμάτων, η οποία περιέχει διαστήματα εγκλεισμού για τους ολικούς ελαχιστοποιητές του minimax προβλήματος.

Σε αντίθεση με τον Αλγόριθμο 4.5 εδώ έχουμε υιοθετήσει ένα πιο αυστηρό κριτήριο τερματισμού²,

$$w_{\text{rel}}([y]) \leq \epsilon,$$

όπου $\epsilon = 10^{-12}$ ενώ η παράμετρος p κατά τον υπολογισμό των διαστημάτων εγκλεισμού $F_p([x])$ και $F'_p([x])$ είχε σταθερή τιμή $p = 10^{+308}$, τον μεγαλύτερο αναπαραστάσιμο αριθμό μηχανής.

5.6 Αριθμητικά αποτελέσματα

Ο Αλγόριθμος 5.1 καθώς και μια βιβλιοθήκη συναρτήσεων για την υπερφόρτωση των εντροπικών συναρτήσεων εγκλεισμού F_p και F'_p έχουν υλοποιηθεί σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Έχουν ελεγχθεί σε ένα υπολογιστικό σύστημα με επεξεργαστή Pentium III στα 866MHz με 256MB RAM και λειτουργικό σύστημα Linux. Απώτερος στόχος μας ήταν να αποτιμηθεί η προαναφερθείσα τεχνική ομαλοποίησης (συνάρτηση μέγιστης εντροπίας) στα πλαίσια ενός αλγόριθμου διακλάδωσης και φραξίματος. Γι' αυτό το σκοπό υλοποιήσαμε δύο διαφορετικές εκδόσεις του Αλγορίθμου 5.1.

Συγκρίνουμε την προτεινόμενη μέθοδο (P) η οποία χρησιμοποιεί γραμμικά βήματα αποκοπής όπως περιγράφεται στον Αλγόριθμο 5.1, με την κλασσική μέθοδο (M) η οποία χρησιμοποιεί το κριτήριο της μονοτονίας, το cut-off test και διχοτόμηση ως κανόνα υποδιαίρεσης.

Το σύνολο των minimax προβλημάτων που χρησιμοποιήθηκαν για την αποτίμηση της περιγραφόμενης μεθόδου αποτελούνταν από 10 μονοδιάστατα προβλήματα που περιγράφονται στη συνέχεια [SHW97, Wol99]:

1. $f(x) = \max\{x/4, x(1-x)\}$, $[x] = [1/2, 3/2]$
 $\mathcal{X}^* = \{3/4\}$, $f^* = 3/16$.
2. $f(x) = \max\{|x|, |x-1|\}$, $[x] = [-1, 2]$,
 $\mathcal{X}^* = \{1/2\}$, $f^* = 1/2$.
3. $f(x) = \max\{|x|, |x-1|, -|x-2|\}$, $[x] = [-3, 3]$,
 $\mathcal{X}^* = \{1\}$, $f^* = 1$.
4. $f(x) = \max\{\sin(x/10), \cos(x/10)\}$, $[x] = [0, 20\pi + 1]$,
 $\mathcal{X}^* = \{50\pi/4\}$, $f^* = -1/\sqrt{2}$.

²Βλέπε βήμα 24 στον Αλγόριθμο 5.1

$$5. f(x) = \max \{x(2-x), (x-1)(3-x)\}, \quad [x] = [5/4, 5/2], \\ \mathcal{X}^* = \{3/2, 5/2\}, \quad f^* = 3/4.$$

$$6. f(x) = \max \{-2x + 3x^2 - x^3, 2x - 3x^2 + x^3\}, \quad [x] = [0, 2], \\ \mathcal{X}^* = \{0, 1, 2\}, \quad f^* = 0.$$

$$7. f(x) = \max \{f_1(x), f_2(x), f_3(x)\}, \quad [x] = [0, 6], \\ f_1(x) = x(x-2)(x-4)(x-6)(x-8), \\ f_2(x) = x(2-x)(x-4)(x-6)(x-8), \\ f_3(x) = (x-2)(x-7). \\ \mathcal{X}^* = \{2, 4, 6\}, \quad f^* = 0.$$

$$8. f(x) = \max \{f_1(x), f_2(x), f_3(x), f_4(x)\}, \quad [x] = [0, 6], \\ f_1(x) = x(x-1)(x-2)(x-3), \\ f_2(x) = (1/2-x)(x-3/2)(x-5/2), \\ f_3(x) = (x-1)(x-4), \\ f_4(x) = (x-2)(x-5). \\ \mathcal{X}^* = \{2.785\dots\}, \quad f^* = -0.838\dots$$

$$9. f(x) = \max \{\sin(10x), \cos(10x)\}, \quad [x] = [-2, 2], \\ \mathcal{X}^* = \{\frac{(8k-3)\pi}{40} \mid k = -2, -1, 0, 1, 2, 3\}, \quad f^* = -1/\sqrt{2}.$$

$$10. f(x) = \max \{\sin(x), \cos(x)\}, \quad [x] = [0, 20\pi], \\ \mathcal{X}^* = \{\frac{(8k+5)\pi}{4} \mid k = 0, \dots, 9\}, \quad f^* = -1/\sqrt{2}.$$

Στον Πίνακα 5.1 συνοψίζονται τα συγκριτικά αποτελέσματα μεταξύ της κλασικής μεθόδου (M) και της προτεινόμενης μεθόδου (P) όταν και οι δύο εφαρμόζονται στη συνάρτηση ομαλοποίησης μέγιστης εντροπίας. Για κάθε ελεγκτική συνάρτηση αναφέρουμε τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών, τον αριθμό των απαιτούμενων παραγώγων, τον αριθμό των υποδιαιρέσεων και το μέγιστο μήκος της λίστας εργασίας. Στο τέλος του Πίνακα 5.1, δίνουμε το συνολικό υπολογιστικό κόστος που απαιτείται και για τις δέκα ελεγκτικές συναρτήσεις αθροίζοντας τους επιμέρους δείκτες αποδοτικότητας. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα η προτεινόμενη μέθοδος παρουσιάζει 80% βελτίωση στον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών, 81% στον αριθμό των παραγώγων και 19% βελτίωση στο απαιτούμενο μήκος της λίστας εργασίας. Η βελτίωση κατά 94% στον αριθμό των υποδιαιρέσεων μας εφιστά για άλλη μια φορά την προσοχή να παρατηρήσουμε ότι ο αλγόριθμός μας όχι μόνο χρησιμοποιεί το εσωτερικό βήμα αποκοπής για τη διαδικασία διακλάδωσης, αλλά επιπλέον τα τμήματα που αποκόπτονται μειώνουν αισθητά το διάστημα αναζήτησης για ολικούς ελαχιστοποιητές.

Στη συνέχεια παραθέτουμε την έξοδο του προγράμματος για κάθε ελεγκτική συνάρτηση. Όπως μπορεί κανείς να παρατηρήσει τα διαστήματα εγκλεισμού τόσο για το ολικό ελάχιστο όσο και για τους ολικούς ελαχιστοποιητές έχουν σχετικό πλάτος μικρότερο της προαπαιτούμενης ακρίβειας $\epsilon = 10^{-12}$.

Function eval.				Derivative eval.			Bisections			List length		
No.	M	P	P/M	M	P	P/M	M	P	P/M	M	P	P/M
1	240	18	8%	157	9	6%	78	2	3%	2	1	50%
2	254	12	5%	167	5	3%	83	1	1%	2	2	100%
3	135	19	14%	87	9	10%	43	4	9%	1	1	100%
4	145	29	20%	93	17	18%	46	6	13%	2	1	50%
5	154	32	21%	87	19	22%	43	0	0%	3	3	100%
6	610	92	15%	323	53	16%	161	1	1%	6	4	67%
7	389	101	26%	253	60	24%	126	0	0%	3	3	100%
8	181	80	44%	113	48	42%	56	19	34%	3	2	67%
9	750	206	27%	487	127	26%	243	3	1%	8	8	100%
10	1348	333	25%	879	207	24%	439	8	2%	13	10	77%
Σ	4206	922	22%	2646	554	21%	1318	44	3%	43	35	81%
			20%				19%				6%	81%

Πίνακας 5.1. Συγκριτικά αποτελέσματα μεταξύ της κλασικής μεθόδου (M) και της μεθόδου δια-κλάδωσης και αποκοπής (P) όταν και οι δύο εφαρμοστούν στη συνάρτηση ομαλοποίησης μέγιστης εντροπίας.

5.6.1 Έξοδος προγράμματος για $\epsilon = 10^{-12}$ και $p = 10^{+308}$

Computing all global minimizers of the function 1	
Search interval : [5.000000000000000E-001, 1.500000000000000E+000]	
Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012	
No. of function calls	:18
No. of derivative calls	:9
No. of bisections	:2
Necessary list length	:1
1.[7.499999999999998E-001, 7.500000000000000E-001]	1.110223024625157E-016
[1.874999999999999E-001, 1.875000000000000E-001]	2.775557561562891E-017
encloses the global minimum value!	
1 interval enclosure(s)	
<hr/>	

Computing all global minimizers of the function 2

Search interval : [-1.000000000000000E+000, 2.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :12

No. of derivative calls :5

No. of bisections :1

Necessary list length :2

1.[4.999999999999998E-001, 5.000000000000002E-001] 2.220446049250313E-016

[5.000000000000000E-001, 5.000000000000000E-001] 0.000000000000000E+000
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 3

Search interval : [-3.000000000000000E+000, 3.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :19

No. of derivative calls :9

No. of bisections :4

Necessary list length :1

1.[9.999999999999998E-001, 1.000000000000001E+000] 5.551115123125783E-016

[1.000000000000000E+000, 1.000000000000000E+000] 0.000000000000000E+000
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 4

Search interval : [0.000000000000000E+000, 1.000000000000000E+001]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :28

No. of derivative calls :17

No. of bisections :6

Necessary list length :1

1.[7.853981633974424E+000, 7.853981633974508E+000] 8.348877145181177E-014

[7.071067811865447E-001, 7.071067811865501E-001] 5.218048215738236E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 5

Search interval : [1.250000000000000E+000, 2.500000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :32

No. of derivative calls :19

No. of bisections :0

Necessary list length :3

1.[1.499999999999999E+000, 1.500000000000465E+000] 4.649614027130156E-013

2.[2.500000000000000E+000, 2.500000000000000E+000] 0.000000000000000E+000

[7.499999999999995E-001, 7.500000000000000E-001] 4.440892098500626E-016
encloses the global minimum value!

2 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 6

Search interval : [0.000000000000000E+000, 2.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :92

No. of derivative calls :53

No. of bisections :1

Necessary list length :4

1.[1.999999999999998E+000, 2.000000000000000E+000] 1.776356839400250E-015

2.[9.99999999999978E-001, 1.00000000000046E+000] 4.785061236134425E-014

3.[0.000000000000000E+000, 3.063949367200013E-020] 3.063949367200013E-020

[-1.776356839400260E-015, 6.931471805599453E-031] 1.776356839400261E-015
encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 7

Search interval : [0.000000000000000E+000, 6.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :101

No. of derivative calls :60

No. of bisections :0

Necessary list length :3

1.[3.99999999999989E+000, 4.000000000000001E+000] 1.154631945610163E-014

2.[1.999999999999361E+000, 2.000000000000001E+000] 6.394884621840902E-013

3.[5.99999999999999E+000, 6.000000000000000E+000] 8.881784197001252E-016

[-5.684341886080855E-014, 6.931471805599453E-031] 5.684341886080854E-014

encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 8

Search interval : [0.000000000000000E+000, 6.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :80

No. of derivative calls :48

No. of bisections :19

Necessary list length :2

1.[2.785364509319894E+000, 2.785364509320416E+000] 5.209166431541234E-013

[-8.382657886382827E-001,-8.382657886376315E-001] 6.510347816401918E-013

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 9

Search interval : [-2.000000000000000E+000, 2.000000000000000E+000]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :206

No. of derivative calls :127

No. of bisections :3
Necessary list length :8

1.[-2.356194490194568E-001,-2.356194490190760E-001] 3.806954751439662E-013
2.[-8.639379797372272E-001,-8.639379797371606E-001] 6.650235917504688E-014
3.[1.021017612416671E+000, 1.021017612416685E+000] 1.243449787580175E-014
4.[1.649336143134639E+000, 1.649336143134643E+000] 3.108624468950438E-015
5.[3.926990816987181E-001, 3.926990816987255E-001] 7.327471962526033E-015
6.[-1.492256510455153E+000,-1.492256510455151E+000] 1.554312234475219E-015

[-7.071067811876693E-001,-7.071067811865454E-001] 1.123767745525583E-012
encloses the global minimum value!

6 interval enclosure(s)

Computing all global minimizers of the function 10

Search interval : [0.000000000000000E+000, 6.283185307179601E+001]

Tolerance (relative) : 1.000000000000000E-012

No. of function calls :333

No. of derivative calls :207

No. of bisections :8

Necessary list length :10

1.[2.905973204570553E+001, 2.905973204570570E+001] 1.563194018672220E-013
2.[3.926990816987205E+000, 3.926990816987280E+000] 7.371880883511039E-014
3.[5.419247327442392E+001, 5.419247327442395E+001] 2.131628207280301E-014
4.[4.162610266006475E+001, 4.162610266006478E+001] 2.131628207280301E-014
5.[2.277654673852599E+001, 2.277654673852601E+001] 1.421085471520200E-014
6.[1.649336143134640E+001, 1.649336143134643E+001] 2.131628207280301E-014
7.[3.534291735288516E+001, 3.534291735288519E+001] 1.421085471520200E-014
8.[4.790928796724433E+001, 4.790928796724436E+001] 1.421085471520200E-014
9.[6.047565858160350E+001, 6.047565858160353E+001] 2.131628207280301E-014
10.[1.021017612416682E+001, 1.021017612416684E+001] 1.065814103640150E-014

[-7.071067811865866E-001,-7.071067811865464E-001] 4.007905118896815E-014
encloses the global minimum value!

10 interval enclosure(s)

5.7 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο εφαρμόσαμε την προτεινόμενη μέθοδο διακλάδωσης και αποκοπής για τον υπολογισμό εγγυημένων φραγμάτων για τις λύσεις μονοδιάστατων προβλημάτων $\min$ - $\max$. Σε αυτή την περίπτωση ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί πρώτης τάξης πληροφορία που συνάγεται από τη συνάρτηση ομαλοποίησης της μη διαφορίσιμης αντικειμενικής συνάρτησης. Οι συναρτήσεις εγκλεισμού που προέκυψαν από τη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας μπορούν να διασφαλίσουν εγγυημένα φράγματα που είναι ανεξάρτητα της εντροπικής παραμέτρου p , αρκεί $p \rightarrow \infty$ όπως απαιτείται από τη θεωρία. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του αλγορίθμου στη συνάρτηση μέγιστης εντροπίας, επαλήθευσαν την εικασία μας ότι το συναρτησιακό της μέγιστης εντροπίας σε συνδυασμό με εργαλεία της διαστηματικής ανάλυσης μπορούν να αποτελέσουν το θεωρητικό υπόβαθρο για την αντιμετώπιση μη διαφορίσιμων προβλημάτων ολικής βελτιστοποίησης από διαστηματικές μεθόδους.

Παράρτημα : Ελεγκτικές συναρτήσεις

- $f(x) = e^{-3x} - \sin^3 x$, $[x] = [0, 20]$

Computing all global minimizers of the function 1

No. of function calls :31

No. of derivative calls :17

No. of bisections :5

Necessary list length :3

1.[1.413716694105782E+001, 1.413717571756291E+001] 6.208107409473292E-007

[-1.000000000000000E+000,-9.9999999999995E-001] 4.440892098500647E-015

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \sum_{k=1}^5 -\cos[(k+1)x] + 4, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 2

No. of function calls :42

No. of derivative calls :23

No. of bisections :6

Necessary list length :4

1.[6.283185307179324E+000, 6.283185354211468E+000] 7.485398124316437E-009

[-1.000000000000000E+000,-9.99999999999920E-001] 7.993605777301192E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = (x - x^2)^2 + (x - 1)^2$, $[x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 3

No. of function calls :60

No. of derivative calls :31

No. of bisections :7

Necessary list length :2

1.[9.999995492950912E-001, 1.000034786324324E+000] 3.523704511398028E-005

[0.000000000000000E+000, 4.062696464623915E-013] 4.062696464623914E-013

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = (3x - 1.4) \sin(18x) + 1.7$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 4

No. of function calls :38

No. of derivative calls :21

No. of bisections :6

Necessary list length :2

1.[6.894530695971607E+000, 6.894530705971385E+000] 1.450392702187068E-009

[-1.758287188448008E+001,-1.758287188447999E+001] 4.647273502830743E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = 2x^2 - 3/100e^{-(200(x-0.0675))^2}$, $[x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 5

No. of function calls :56

No. of derivative calls :33

No. of bisections :3

Necessary list length :3

1.[6.738748170217229E-002, 6.738768718801997E-002] 3.049317803252294E-006

[-2.090266607193919E-002,-2.090266605163968E-002] 9.711439748086821E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \cos(x) - \sin(5x) + 1, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 6

No. of function calls :27

No. of derivative calls :15

No. of bisections :6

Necessary list length :2

1.[2.839347022044718E+000, 2.839347032044719E+000] 3.521936665604592E-009

[-9.528967925474407E-001,-9.528967925474336E-001] 7.340149646678885E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = -x - \sin(3x) + 1.6$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 7

No. of function calls :30

No. of derivative calls :18

No. of bisections :7

Necessary list length :1

1.[6.920063042899379E+000, 6.920063052899380E+000] 1.445073659793408E-009

[-6.262872094177994E+000,-6.262872094177986E+000] 9.927152980946999E-016

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = x + \sin(5x)$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 8

No. of function calls :33

No. of derivative calls :19

No. of bisections :7

Necessary list length :1

1.[9.022062044918724E-001, 9.022062144918726E-001] 1.108394067837258E-008

[-7.758968519440252E-002,-7.758968519439779E-002] 6.081282380299698E-014
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = -e^{-x} \sin(2\pi x) + 1$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 9

No. of function calls :45

No. of derivative calls :24

No. of bisections :5

Necessary list length :3

1.[2.248791056962642E-001, 2.248809173567569E-001] 8.056153046780555E-006

[2.113146125681037E-001, 2.113146125913346E-001] 1.099345574341447E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = e^{-x} \sin(2\pi x)$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 10

No. of function calls :40

No. of derivative calls :22

No. of bisections :7

Necessary list length :2

1.[7.248793602785087E-001, 7.248858315821965E-001] 8.927421640488746E-006

[-4.783618684532102E-001,-4.783618683305894E-001] 2.563347018389056E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = -x + \sin(3x) + 1$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 11

No. of function calls :37

No. of derivative calls :21

No. of bisections :8

Necessary list length :2

1.[5.872865492417889E+000, 5.872865502417891E+000] 1.702746442995182E-009

[-5.815674542981395E+000,-5.815674542981389E+000] 9.163288761803405E-016

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = x \sin(x) + \sin(10x/3) + \ln(x) - 0.84x + 1.3, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 12

No. of function calls :32

No. of derivative calls :18

No. of bisections :5

Necessary list length :2

1.[5.134332837186787E+000, 5.134353481590420E+000] 4.020854176668350E-006

[-7.047444075623206E+000,-7.047444074144356E+000] 2.098418983769471E-010

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = \sin(x) + \sin(10x/3) + \ln(x) - 0.84x$, $[x] = [2.7, 7.5]$

Computing all global minimizers of the function 13

No. of function calls :33

No. of derivative calls :20

No. of bisections :4

Necessary list length :3

1.[5.199778002703228E+000, 5.199790832858275E+000] 2.467442848381162E-006

[-4.601307546554942E+000,-4.601307546494381E+000] 1.316138005488725E-011
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \ln(3x) \ln(2x) - 0.1, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 14

No. of function calls :49

No. of derivative calls :30

No. of bisections :6

Necessary list length :2

1.[4.082459615955391E-001, 4.082493698904657E-001] 8.348631087822893E-006

[-1.411004885112457E-001,-1.411004884732247E-001] 2.694600700032908E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = \sum_{k=0}^5 k \cos((k+1)x + k) + 12, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 15

No. of function calls :47

No. of derivative calls :25

No. of bisections :4

Necessary list length :5

1.[4.858056876952776E+000, 4.858062023424620E+000] 1.059368379931716E-006

[-8.708854977422278E-001, -8.708854977256628E-001] 1.902083759561617E-011

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = -\sum_{k=1}^5 k \sin((k+1)x + k) + 3, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 16

No. of function calls :53

No. of derivative calls :29

No. of bisections :7

Necessary list length :4

1.[5.791794460923663E+000, 5.791794470923664E+000] 1.726580750555318E-009

[-9.031249442167191E+000,-9.031249442167107E+000] 9.244432012031560E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = \sin^2(1 + (x - 1)/4) + ((x - 1)/4)^2$, $[x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 17

No. of function calls :48

No. of derivative calls :28

No. of bisections :6

Necessary list length :3

1.[-7.878995529263081E-001,-7.877550811972710E-001] 1.833967593297046E-004

[4.756886254421391E-001, 4.756886263871898E-001] 1.986700002462479E-009

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \sqrt{x} \sin^2(x)$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 18

No. of function calls :54

No. of derivative calls :31

No. of bisections :3

Necessary list length :3

1.[6.283185304661507E+000, 6.283185312162068E+000] 1.193751227962752E-009

2.[3.141592653230373E+000, 3.141592663230374E+000] 3.183098842856884E-009

[0.000000000000000E+000, 2.658255002212240E-032] 2.658255002212240E-032

encloses the global minimum value!

- $f(x) = x^2 - \cos(18x), \quad [x] = [-5, 5]$

Computing all global minimizers of the function 19

No. of function calls :44

No. of derivative calls :21

No. of bisections :1

Necessary list length :2

1.[-9.999999276876631E-009, 9.999999276876631E-009] 1.999999855375326E-008

[-1.000000000000000E+000,-9.99999999999985E-001] 1.443289932012706E-015

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = e^{x^2}$, $[x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 20

No. of function calls :14

No. of derivative calls :7

No. of bisections :3

Necessary list length :2

1.[-1.0000000000000001E-008, 1.0000000000000001E-008] 2.0000000000000000E-008

[1.0000000000000000E+000, 1.0000000000000000E+000] 0.0000000000000000E+000
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = (x^2/20) - \cos(x) + 2, \quad [x] = [-20, 20]$

Computing all global minimizers of the function 21

No. of function calls :22

No. of derivative calls :11

No. of bisections :3

Necessary list length :2

1.[-1.0000000000000001E-008, 1.0000000000000001E-008] 2.000000000000000E-008

[1.000000000000000E+000, 1.0000000000000002E+000] 1.554312234475219E-015
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \cos(x) + 2 \cos(2x)e^{-x}$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 22

No. of function calls :69

No. of derivative calls :41

No. of bisections :8

Necessary list length :3

1.[3.250985669708086E+000, 3.251115283615001E+000] 3.986911050446281E-005

[-9.183973417641916E-001,-9.183973408783249E-001] 9.645787970691800E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = (x + \sin(x)) e^{-x^2}$, $[x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 23

No. of function calls :82

No. of derivative calls :47

No. of bisections :9

Necessary list length :4

1.[-6.795952439794260E-001,-6.795454132372685E-001] 7.332952468912517E-005

[-8.242393991530494E-001,-8.242393984600353E-001] 8.407921058258027E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = 2 \sin(x)e^{-x}$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 24

No. of function calls :74

No. of derivative calls :43

No. of bisections :9

Necessary list length :3

1.[3.926926317933940E+000, 3.927004663357628E+000] 1.995082600061695E-005

[-2.786407021862516E-002,-2.786407019538569E-002] 8.340294628857754E-010
encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

- $f(x) = 2 \cos(x) + \cos(2x) + 5, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 25

No. of function calls :91

No. of derivative calls :57

No. of bisections :11

Necessary list length :3

1.[2.094395098801073E+000, 2.094395108801074E+000] 4.774648483965111E-009

2.[4.188790202228821E+000, 4.188790212228823E+000] 2.387324345364156E-009

[3.499999999999996E+000, 3.500000000000003E+000] 1.522591576628788E-015

encloses the global minimum value!

2 interval enclosure(s)

• $f(x) = e^{\sin(3x)}$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 26

No. of function calls :63

No. of derivative calls :37

No. of bisections :7

Necessary list length :4

1.[1.570796326790409E+000, 1.570834948636567E+000] 2.458743090852759E-005

2.[3.665191429188089E+000, 3.665191570572756E+000] 3.857497445476465E-008

3.[5.759586526025969E+000, 5.759586536025971E+000] 1.736235888152125E-009

[3.678794411714421E-001, 3.678794411714433E-001] 3.017899073375404E-015

encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

- $f(x) = \sin(x) \cos(x) - 1.5 \sin^2(x) + 1.2$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 27

No. of function calls :89

No. of derivative calls :55

No. of bisections :3

Necessary list length :5

1.[5.006371422490242E+000, 5.006391453998638E+000] 4.001203008060331E-006

2.[1.864796314586466E+000, 1.864812616877937E+000] 8.742129820184190E-006

[-4.513878190286867E-001,-4.513878188647255E-001] 3.632378092728396E-010

encloses the global minimum value!

2 interval enclosure(s)

• $f(x) = \sin(x)$, $[x] = [0, 20]$

Computing all global minimizers of the function 28

No. of function calls :56

No. of derivative calls :33

No. of bisections :5

Necessary list length :3

1.[1.099557428755482E+001, 1.099557921915658E+001] 4.485078837676226E-007

2.[1.727874643020647E+001, 1.727875959492296E+001] 7.619022908673065E-007

3.[4.712386869912474E+000, 4.712388980385204E+000] 4.478564231661282E-007

[-1.000000000000000E+000,-9.99999999999985E-001] 1.443289932012706E-015

encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

- $f(x) = 2(x - 3)^2 - e^{x/2} + 5$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 29

No. of function calls :95

No. of derivative calls :55

No. of bisections :6

Necessary list length :4

1.[3.862072885512997E+000, 3.862105756998549E+000] 8.511358155286799E-006

[-4.103152070229524E-001,-4.103152066522071E-001] 9.035620952100598E-010

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = -e^{\sin(3x)} + 2, \quad [x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 30

No. of function calls :80

No. of derivative calls :49

No. of bisections :5

Necessary list length :4

- 1.[5.235987755975133E-001, 5.235990637320029E-001] 5.502963393320499E-007
- 2.[2.617993676581451E+000, 2.617993877991500E+000] 7.693297716974700E-008
- 3.[4.712388980383854E+000, 4.712390049052870E+000] 2.267786082734182E-007
- 4.[6.806784082777882E+000, 6.806784207809212E+000] 1.836863442137825E-008

[-7.182818284590482E-001,-7.182818284590393E-001] 1.236531935668723E-014
encloses the global minimum value!

4 interval enclosure(s)

- $f(x) = -\sum_{i=1}^{10} 1/((k_i(x - a_i))^2 + c_i), \quad [x] = [0, 10]$

$a = (3.040, 1.098, 0.674, 3.537, 6.173, 8.679, 4.503, 3.328, 6.937, 0.700),$

$k = (2.983, 2.378, 2.439, 1.168, 2.406, 1.236, 2.868, 1.378, 2.348, 2.268),$

$c = (0.192, 0.140, 0.127, 0.132, 0.125, 0.189, 0.187, 0.171, 0.188, 0.176).$

Computing all global minimizers of the function
31

No. of function calls
:78

No. of derivative calls
:42

No. of bisections
:9

Necessary list length
:4

1.[6.858588226705504E-001, 6.858727432392236E-001]
2.029655114576822E-005

[-1.459265202777930E+001,-1.459265202569012E+001]
1.431663571401793E-010

encloses the global minimum value!

1 interval enclosure(s)

• $f(x) = \sin(1/x)$, $[x] = [0.02, 1.0]$

Computing all global minimizers of the function 32

No. of function calls :173

No. of derivative calls :105

No. of bisections :7

Necessary list length :8

1.[9.094567329315682E-002, 9.094568322833759E-002]	1.092430283010492E-007
2.[2.122065832107513E-001, 2.122065932107227E-001]	4.712375582746711E-008
3.[5.787451619008113E-002, 5.787452619004800E-002]	1.727870488236238E-007
4.[2.767911267798798E-002, 2.767912267788761E-002]	3.612796310717620E-007
5.[4.244130817007808E-002, 4.244131816538587E-002]	2.355089465161119E-007
6.[2.357850156587733E-002, 2.357851156501803E-002]	4.240787168394522E-007
7.[3.350629381818080E-002, 3.350630381119416E-002]	2.982428736681491E-007
8.[2.053611171566042E-002, 2.053612169148568E-002]	4.857699154928046E-007

[-1.000000000000000E+000,-9.99999999999985E-001] 1.443289932012706E-015
encloses the global minimum value!

8 interval enclosure(s)

• $f(x) = -\sum_{k=1}^5 k \sin((k+1)x + k), \quad [x] = [-10, 10]$

Computing all global minimizers of the function 33

No. of function calls :181

No. of derivative calls :103

No. of bisections :8

Necessary list length :15

- 1.[5.791794461396682E+000, 5.791794471396683E+000] 1.726580750414307E-009
- 2.[-6.774576153438631E+000,-6.774576143438629E+000] 1.476107230278753E-009
- 3.[-4.913908380760952E-001,-4.913908280760951E-001] 2.035040029013123E-008

[-1.203124944216720E+001,-1.203124944216711E+001] 5.905810025597094E-015
encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

- $f(x) = (x^2 - 5x + 6)/(x^2 + 1) - 0.5$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 34

No. of function calls :126

No. of derivative calls :71

No. of bisections :10

Necessary list length :5

1.[2.414184978417519E+000, 2.414264613767014E+000] 3.298643235929725E-005

2.[2.414129158357746E+000, 2.414183665245702E+000] 2.257828159939825E-005

[-5.355339080353058E-001,-5.355339059212919E-001] 3.947488346651028E-009

encloses the global minimum value!

2 interval enclosure(s)

- $f(x) = -\sum_{i=1}^{10} 1/((k_i(x - a_i))^2 + c_i), \quad [x] = [0, 10]$

$a = (4.696, 4.885, 0.800, 4.986, 3.901, 2.395, 0.945, 8.371, 6.181, 5.713),$

$k = (2.871, 2.328, 1.111, 1.263, 2.399, 2.629, 2.853, 2.344, 2.592, 2.929),$

$c = (0.149, 0.166, 0.175, 0.183, 0.128, 0.117, 0.115, 0.148, 0.188, 0.198).$

Computing all global minimizers of the function 35

No. of function calls :177

No. of derivative calls :97

No. of bisections :10

Necessary list length :7

1.[4.855547385747154E+000, 4.855559382212880E+000]	2.470672155320794E-006
2.[4.855559837900814E+000, 4.855576652976777E+000]	3.463056068344299E-006
3.[4.855579103644609E+000, 4.855592247232935E+000]	2.706904376146779E-006

[-1.392234489605649E+001,-1.392234487644826E+001]	1.408399303336999E-009
---	------------------------

 encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

• $f(x) = (x + 1)^3/x^2 - 7.1$, $[x] = [0.2, 7.0]$

Computing all global minimizers of the function 36

No. of function calls :319

No. of derivative calls :175

No. of bisections :8

Necessary list length :10

1.[1.999983258401565E+000, 2.000007495689096E+000]	1.211874520829651E-005
2.[2.000007716454399E+000, 2.000017549555556E+000]	4.916531608675536E-006
3.[2.000019050883959E+000, 2.000030801309352E+000]	5.875156732662429E-006
4.[1.999972639525799E+000, 1.999982570591868E+000]	4.965600964350227E-006
5.[1.999956514437374E+000, 1.999969266498338E+000]	6.376169117575659E-006

[-3.500000007539620E-001,-3.49999999987704E-001] 2.157690058377800E-009
encloses the global minimum value!

5 interval enclosure(s)

- $f(x) = x^4 - 12x^3 + 47x^2 - 60x - 20e^{-x}$, $[x] = [-1, 7]$

Computing all global minimizers of the function 37

No. of function calls :148

No. of derivative calls :82

No. of bisections :11

Necessary list length :6

1.[7.136412238863512E-001, 7.136899957637834E-001] 6.834229273713732E-005

2.[7.136943999589399E-001, 7.137338063016897E-001] 5.521458869799135E-005

3.[7.135950326566928E-001, 7.136354082954364E-001] 5.658060509917880E-005

[-3.278126131595700E+001,-3.278126129319628E+001] 6.943209346049248E-010

encloses the global minimum value!

3 interval enclosure(s)

• $f(x) = x^6 - 15x^4 + 27x^2 + 250, \quad [x] = [-4, 4]$

Computing all global minimizers of the function 38

No. of function calls :310

No. of derivative calls :184

No. of bisections :8

Necessary list length :10

1.[-3.000002936462759E+000,-2.999996472019987E+000]	2.154816791003301E-006
2.[2.999999037016601E+000, 3.000002259500040E+000]	1.074161490756641E-006
3.[3.000002554871467E+000, 3.000007001479827E+000]	1.482201523858701E-006
4.[2.999996207592509E+000, 2.999999018900228E+000]	9.371037573516783E-007

[6.999999988685445E+000, 7.000000000101438E+000] 1.630855960851560E-009
encloses the global minimum value!

4 interval enclosure(s)

- $f(x) = x^4 - 10x^3 + 35x^2 - 50x + 24$, $[x] = [-10, 20]$

Computing all global minimizers of the function 39

No. of function calls :791

No. of derivative calls :430

No. of bisections :8

Necessary list length :23

1. [1.381969842486062E+000, 1.381977959552658E+000] 5.873548282229037E-006
2. [1.381962099522905E+000, 1.381969761875781E+000] 5.544546320975853E-006
3. [3.618030919811597E+000, 3.618035740488090E+000] 1.332403342883289E-006
4. [3.618025913713986E+000, 3.618030876320130E+000] 1.371633664796156E-006
5. [3.618035754659137E+000, 3.618040462279789E+000] 1.301153711778720E-006
6. [3.618040658024669E+000, 3.618045662678161E+000] 1.383249654653969E-006
7. [1.381954986916868E+000, 1.381962056286665E+000] 5.115484848181357E-006
8. [1.381945719292658E+000, 1.381954092126907E+000] 6.058728741122240E-006
9. [3.618021807827179E+000, 3.618025813756582E+000] 1.107215383210553E-006
- 10.[3.618016508424990E+000, 3.618021045637037E+000] 1.254060625501434E-006
- 11.[3.618045847752802E+000, 3.618049139897606E+000] 9.099234619925757E-007

[-1.000000002584121E+000,-9.99999999999360E-001] 2.584184866094740E-009

encloses the global minimum value!

11 interval enclosure(s)

• $f(x) = 24x^4 - 142x^3 + 303x^2 - 276x + 3, \quad [x] = [0, 3]$

Computing all global minimizers of the function 40

No. of function calls :650

No. of derivative calls :339

No. of bisections :9

Necessary list length :25

1.[	1.999997752701722E+000,	2.000002074746200E+000]	2.161024666944903E-006
2.[	2.000002105145092E+000,	2.000004335680580E+000]	1.115266569813095E-006
3.[	1.999995488334555E+000,	1.999997716806128E+000]	1.114238299283757E-006
4.[	2.000004401268181E+000,	2.000006437315012E+000]	1.018021174830369E-006
5.[	1.999993390989421E+000,	1.999995417297232E+000]	1.013157252866492E-006
6.[	2.000006733391160E+000,	2.000008964390861E+000]	1.115496094510449E-006
7.[	1.999990852702067E+000,	1.999993078504906E+000]	1.112906509064023E-006

[9.999999959696939E-001, 1.0000000000000683E+000] 4.030988226137123E-009
encloses the global minimum value!

7 interval enclosure(s)

Βιβλιογραφία

- [AH83] G. Alefeld and J. Herzberger. Introduction to Interval Computations. Academic Press, London, 1983.
- [AL85] G. Alefeld and R. Lohner. On higher order centered forms. Computing, 35: 177–184, 1985.
- [Ale90] G. Alefeld. Enclosure methods. In C. Ullrich, editor, Computer Arithmetic and Self-Validating Numerical Methods, pages 55–72. Academic Press, Boston, 1990.
- [Arm83] M.A. Armstrong. Basic Topology. Springer, 1983.
- [Bau88] E. Baumann. Optimal centered forms. BIT, 28:80–87, 1988.
- [Ber89] D. Bertsekas. Constrained Optimization and Lagrange Multiplier Methods. Academic Press, New York, 1989.
- [Ber96] S. Berner. New results on verified global optimization. Computing, 57: 323–343, 1996.
- [CC78] C. Charalambous and A.R. Conn. An efficient method to solve the minimax problem directly. SIAM Journal on Numerical Analysis, 15:162–187, 1978.
- [CGM93] O. Caprani, B. Godthaab, and K. Madsen. Use of a real value local minimum in parallel interval global optimization. Interval Computations, 2:71–82, 1993.
- [CM80] O. Caprani and K. Madsen. Mean value forms in interval analysis. Computing, 25:147–154, 1980.
- [CMG01] L.G. Casado, J.A. Martínez, and I. García. Experiments with a new selection criterion in a fast interval optimization algorithm. Journal of Global Optimization, 19:247–264, 2001.
- [CMGS03] L.G. Casado, J.A. Martínez, I. García, and Ya.D. Sergeyev. New interval analysis support functions using gradient information in a global minimization algorithm. Journal of Global Optimization, 25(4):345–362, 2003.

- [CR97] T. Csendes and D. Ratz. Subdivision direction selection in interval methods for global optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 34:922–938, 1997.
- [Cse01] T. Csendes. New subinterval selection criteria for interval global optimization. *Journal of Global Optimization*, 19:307–327, 2001.
- [GG90] C. Gigola and S. Gomez. A regularization method for solving the finite convex min-max problem. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 27:1621–1634, 1990.
- [Han69] E.R. Hansen. *Topics in Interval Analysis*. Oxford University Press, London, 1969.
- [Han79] E. Hansen. Global optimization using interval analysis: The one-dimensional case. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 29:331–344, 1979.
- [Han80] Eldon Hansen. Global optimization using interval analysis – the multi-dimensional case. *Numer. Math.*, 34:247–270, 1980.
- [Han92] E. Hansen. *Global Optimization using Interval Analysis*. Marcel Dekker, New York, 1992.
- [Her02] P. Hertling. A lower bound for range enclosure in interval arithmetic. *Theoretical Computer Science*, 279(1-2):83–95, 2002.
- [HHKR95] R. Hammer, M. Hocks, U. Kulisch, and D. Ratz. *C++ Toolbox for Verified Computing I, Basic Numerical Problems: Theory, Algorithms, and Programs*. Springer-Verlag, 1995.
- [HJX94] P. Hansen, B. Jaumard, and J. Xiong. Cord-slope form of Taylor’s expansion in univariate global optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 80(3):441–464, 1994.
- [HK04] W. Hofschuster and W. Krämer. C-XSC 2.0 – A C++ library for extended scientific computing. In G. Goos, J. Hartmanis, and J. van Leeuwen, editors, *Numerical Software with Result Verification*, volume 2991 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 15–35. Springer, 2004. ISBN 3-540-21260-4.
- [HM92] T. Henriksen and K. Madsen. Use of a depth-first strategy in parallel global optimization. Technical Report 92-10, Institute of Numerical Analysis, Technical University of Denmark, Lyngby, 1992.
- [HS80] E. Hansen and S. Sengupta. Global contained optimization using interval analysis. In K. Nickel, editor, *Interval Mathematics 1980*, pages 25–47. Springer-Verlag, Berlin, 1980.

- [HUL93] J.-B. Hiriart-Urruty and C. Lemarechal. *Convex Analysis and Minimization Algorithm*. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [IF79] K. Ichida and Y. Fujii. An interval arithmetic method for global optimization. *Computing*, 23:85–97, 1979.
- [Jan91] C. Jansson. A global minimization method: the one-dimensional case. Technical Report 91.2, Technische Universitat Hamburg-Harburg, 1991.
- [Jan94a] C. Jansson. On self-validated methods for optimization problems. In J. Herzberger, editor, *Topics in Validated Computations - Studies in Computational Mathematics* 5, pages 381–438. North-Holland, Amsterdam, 1994.
- [Jan94b] C. Jansson. On self-validating methods for optimization problems. In J. Herzberger, editor, *Topics in Validated Numerics*, pages 381–438. Elsevier Science, 1994.
- [Jay57] E.T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Physics Review*, 106:620–630, 1957.
- [Kea96] R.B. Kearfott. *Rigorous Global Search: Continuous Problems*. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1996.
- [KI88] K. Kubota and M. Iri. Formulation of fast automatic differentiation and analysis of its complexity. *Transactions of Information Processing Society of Japan*, 29:551–560, 1988.
- [KN85] R. Krawczyk and A. Neumaier. Interval slopes for rational functions and associated centered forms. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 22: 604–616, 1985.
- [KSG04] A.E. Kostopoulos, D.G. Sotiropoulos, and T.N. Grapsa. A new efficient variable learning rate for perry’s spectral conjugate gradient training method. In Demos T. Tsahalis, editor, *Proceedings of the 1st International Conference “From Scientific Computing to Computational Engineering”*, Athens, 8-10 September, 2004, 2004.
- [LD60] A.H. Land and A.G. Doig. An automated method for solving discrete programming problems. *Econometrica*, 28:497520, 1960.
- [Li87] X.-S. Li. *Entropy and Optimization*. PhD thesis, University of Liverpool, United Kingdom, 1987.
- [LSMK63] J.D. Little, K.C. Murty, D.W. Sweeney, and C. Karel. An algorithm for the travelling salesman problem. *Oper. Res.*, 11:972989, 1963.
- [Moo66] R.E. Moore. *Interval Analysis*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1966.

- [Moo79] Ramon E. Moore. *Methods and Applications of Interval Analysis*. Siam, Philadelphia, 1979.
- [Neu90] A. Neumaier. *Interval Methods for systems of equations*. Cambridge University Press, 1990.
- [PGL93] G. Di Pillo, L. Grippo, and S. Lucidi. A smooth method for the finite minimax problem. *Mathematical Programming*, 60:187–214, 1993.
- [PMH91] E. Polak, D.Q. Mayne, and J.E. Higgins. Superlinearly convergent algorithm for min-max problems. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 69:407–439, 1991.
- [Pol88] R.A. Polyak. Smooth optimization methods for minimax problems. *SIAM Journal of Control Optimization*, 26:1274–1286, 1988.
- [Ral81] L.B Rall. *Automatic Differentiation, Techniques and Applications*. Lecture Notes in Computer Science, . 120. Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- [Ral83a] L.B. Rall. Mean value and Taylor forms in interval analysis. *SIAM J. Math. Anal.*, 14(2):223–238, 1983.
- [Ral83b] L.B. Rall. Representations of intervals and optimal error bounds. *Mathematics of Computation*, 41(163):219–227, 1983.
- [Rat92] D. Ratz. *Automatische Ergebnisverifikation bei globalen Optimierungsproblemen*. PhD thesis, Universität Karlsruhe, 1992.
- [Rat96] D. Ratz. Inclusion isotone extended interval arithmetic : A toolbox update. Technical Report 5/1996, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Karlsruhe, 1996.
- [Rat98] D. Ratz. *Automatic Slope Computation and its Application in Nonsmooth Global Optimization*. Shaker Verlag, Aachen, 1998.
- [Rat99] D. Ratz. A nonsmooth global optimization technique using slopes: The one-dimensional case. *Journal of Global Optimization*, 14:365–393, 1999.
- [RC95] D. Ratz and T. Csendes. On the selection of subdivision directions in interval branch-and-bound methods for global optimization. *Journal of Global Optimization*, 7:183–207, 1995.
- [Ris72] F.N. Ris. *Interval analysis and application to linear algebra*. PhD thesis, Oxford University, 1972.
- [RR84] H. Ratschek and J. Rokne. *Computer Methods for the Range of Functions*. Ellis Horwood, Chichester, 1984.
- [RR88] H. Ratschek and J. Rokne. *New Computer Methods for Global Optimization*. Ellis Horwood, Chichester, 1988.

- [RR95] H. Ratschek and J. Rokne. Interval methods. In R.K. Horst and P.M. Pardalos, editors, *Handbook of Global Optimization*, pages 751–828. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1995.
- [SG01] D.G. Sotiropoulos and T.N. Grapsa. A branch-and-prune method for global optimization: the univariate case. In W. Krämer and J.W. von Gudenberg, editors, *Scientific Computing, Validated Numerics, Interval Methods*, pages 215–226. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2001. ISBN 0-306-46706-2.
- [SG02] D.G. Sotiropoulos and T.N. Grapsa. An interval branch and bound algorithm for global optimization using pruning steps. In E.A. Lipitakis, editor, *Proceedings of the Fifth Hellenic-European Conference on Computer Mathematics and its Applications (HERCMA 2001)*, volume 2, pages 455–459. LEA Press, 2002. ISBN 960-85176-7-2.
- [SG05] D.G. Sotiropoulos and T.N. Grapsa. Optimal centers in branch-and-prune algorithms for univariate global optimization. *Applied Mathematics and Computation*, in press, 2005.
- [SHW97] Z. Shen, Z.Y. Huang, and M.A. Wolfe. An interval maximum entropy method for a discrete minimax problem. *Applied Mathematics and Computation*, 87:49–68, 1997.
- [Ske74] S. Skelboe. Computation of rational interval functions. *BIT*, 14:87–95, 1974.
- [SKG02] D.G. Sotiropoulos, A.E. Kostopoulos, and T.N. Grapsa. A spectral version of Perry’s conjugate gradient method for neural network training. In Demos T. Tsahalis, editor, *Proceedings of 4th GRACM Congress on Computational Mechanics (GRACM 2002)*, volume I, pages 291–298, 2002.
- [Sot04] D.G. Sotiropoulos. Solving discrete minimax problems using interval arithmetic. In A. Rubinov and M. Sniedovich, editors, *Proceedings of the Sixth International Conference on Optimization: Techniques and Applications (ICOTA6 2004)*, Ballarat, Australia, December 2004.
- [Sot05] D.G. Sotiropoulos. Solving discrete minimax problems using interval arithmetic. Submitted for publication, 2005.
- [TC02] B. Tóth and T. Csendes. Empirical investigation of the convergence speed of inclusion functions. Submitted, 2002. Available at <http://www.inf.u-szeged.hu/~csendes/bogicikk.ps>.
- [Var92] A. Vardi. New minimax algorithm. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 75:613–633, 1992.
- [VLC] T. Vinko, J.-L. Lagouanelle, and T. Csendes. A new inclusion function for optimization: Kite – the one dimensional case. To appear in *Journal of Global Optimization*.

- [Wol99] M.A. Wolfe. On discrete minimax problems in $\mathbb{R}$ using interval arithmetic. *Reliable Computing*, 5:371–383, 1999.
- [Zan80] I. Zang. A smoothing out technique for min-max optimization. *Mathematical Programming*, 19:61–77, 1980.