Μη Γραμμικές Μέθοδοι Συζυγών Κλίσεων για Βελτιστοποίηση και Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Διδακτορική Διατριβή

Ιωάννης Ε. Λιβιέρης

Πανεπιστήμιο Πατρών
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Μαθηματικών

Πάτρα, Σεπτέμβριος 2012

Στην οικογένεια μου, για τη στήριξη
και την υπομονή τους.

Ευχαριστίες

Ολοκληρώνοντας τη διδακτορική μου διατριβή αισθάνομαι την υποχρέωση να ευχαριστήσω τους ανθρώπους που ο καθένας με το δικό του τρόπο με στήριξαν κατά τη περίοδο των σπουδών μου.

Καταρχάς, θέλω να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στον επιβλέποντα μου κ. Παναγιώτη Πιντέλα, Καθηγητή του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Πατρών. Καθ' όλη τη διάρκεια της ερευνητικής μου πορείας, η ουσιαστική καθοδήγησή του και οι υποδείξεις του στην αντιμετώπιση των δυσκολιών που συνάντησα ήταν καταλυτική. Οι πολύτιμες συμβουλές του, η εμπιστοσύνη που μου έδειξε και κυρίως η υπομονή του με βοήθησαν τα μέγιστα για την ολοκλήρωση της διατριβής μου. Θα ήθελα να ευχαριστήσω επίσης και τα άλλα δύο μέλη της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής, τον κ. Μιχαήλ Βραχάτη, Καθηγητή του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Πατρών και τον κ. Σπύρο Λυκοθανάση, Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Η/Υ του Πανεπιστημίου Πατρών για τις εύστοχες παρατηρήσεις τους.

Κατά τη διάρκεια των σπουδών μου, ήμουν στην ευχάριστη θέση να συνεργαστώ με εξαιρετους επιστήμονες όπως ο Δρ. Δημήτρης Σωτηρόπουλος και η Δρ. Μαριάννα Αποστολοπούλου, των οποίων η συμπαράσταση και οι συμβουλές ήταν ανεκτίμητες κατά τη διάρκεια ολοκλήρωσης της διατριβής μου. Θα ήθελα να τους ευχαριστήσω θερμά για τις εκτενέστατες επιστημονικές συζητήσεις και συνεργασίες που είχαμε καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης των σπουδών μου. Δεν θα ήταν υπερβολή να πω ότι τους αισθάνομαι σαν οικογένειά μου και χωρίς τη συμβολή τους το αποτέλεσμα της διατριβής μου θα ήταν πολύ διαφορετικό.

Θερμές ευχαριστίες θέλω να απευθύνω και στους αδελφικούς μου φίλους Αθανάσιο Δρακόπουλο, Ευστάθιο Θεοδωρόπουλο και Κυριάκο Ταραντίνο γιατί στάθηκαν πάντα δίπλα μου στις δύσκολες στιγμές και μου έδιναν κουράγιο να συνεχίσω. Επίσης, θέλω να ευχαριστήσω τους φίλους Διονύσιο Σέρρα και Μαργαρίτα Πιντέλα καθώς και τους συναδέλφους Γρηγόρη Βουνάτσο, Κωνσταντίνα Δρακοπούλου, Μαρία Κοντογιάννη, Ιωάννη Νομικό και Λεωνίδα Σκούτα για τη στήριξη και τη συμπαράστασή τους στο στάδιο της συγγραφής της παρούσας εργασίας.

Τέλος θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στους γονείς μου Ευάγγελο και Ιωάννα καθώς και στην αδελφή μου Γεωργία για τη συμπαράσταση και την υπομονή τους όλα αυτά τα δύσκολα χρόνια των σπουδών μου.

*Ιωάννης Ε. Λιθιέρης
Πάτρα, Σεπτέμβριος 2012.*

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	i
Περιεχόμενα	ii
Κατάλογος Σχημάτων	ix
Κατάλογος Αλγορίθμων	xi
Κατάλογος Πινάκων	xiii
I Εισαγωγή και Βασικές Έννοιες	1
1 Εισαγωγή	3
1.1 Το Πρόβλημα της Βελτιστοποίησης	4
1.2 Περίληψη της Διατριβής	5
2 Μαθηματικό Υπόβαθρο	9
2.1 Πίνακες και Διανύσματα	9
2.1.1 Νόρμα Πίνακα	13
2.1.2 Νόρμα Διανύσματος	13
2.2 Ρυθμός Σύγκλισης	15
2.3 Ιδιοτιμές και Ιδιοδιανύσματα	16
2.3.1 Η Μέθοδος της Αντίστροφης Δύναμης	17
2.4 Παράγωγοι και Προσέγγιση κατά Taylor	18
2.4.1 Κατά Lipschitz Συνεχής Συνάρτηση	20
2.4.2 Κυρτότητα	20
2.5 Στοιχεία Βελτιστότητας	21
2.5.1 Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς	22
II Μαθηματικές Μέθοδοι Μη Γραμμικής Βελτιστοποίησης	25
3 Μη Γραμμικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης χωρίς Περιορισμούς	27
3.1 Βασικές Στρατηγικές Βελτιστοποίησης	27
3.2 Γραμμική Αναζήτηση	28
3.2.1 Συνθήκη Armijo	29
3.2.2 Συνθήκες Wolfe	29

3.2.3	Ισχυρές Συνθήκες Wolfe	29
3.2.4	Αλγόριθμος Γραμμικής Αναζήτησης	30
3.3	Καμπυλόγραμμη Αναζήτηση	31
3.3.1	Συνθήκες Βήματος Δεύτερης Τάξης	32
3.3.2	Η Μέθοδος των Moré και Sorensen	34
3.4	Μέθοδος της Απότομης Μείωσης	35
3.5	Μέθοδος Newton	36
3.6	Μέθοδοι Quasi-Newton	37
3.6.1	Μέθοδοι Quasi-Newton Περιορισμένης Μνήμης	38
3.6.2	Μέθοδοι Quasi-Newton Ελαχίστης Μνήμης	39
3.7	Μέθοδοι Μη Γραμμικών Συζυγών Κλίσεων	40
4	Μέθοδοι Μη Γραμμικών Συζυγών Κλίσεων	41
4.1	Μέθοδος Hestenes-Stiefel	42
4.2	Μέθοδος Fletcher-Reeves	43
4.3	Μέθοδος Polak-Ribière	43
4.4	Μέθοδος Perry	45
4.5	Μέθοδος Dai-Liao	46
4.6	Φασματική Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων	48
4.7	Βελτίωση της Αποδοτικότητας και των Ιδιοτήτων Σύγκλισης των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων	49
4.7.1	Τροποποίηση των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων Χρησιμοποιώντας Νέες Εξισώσεις της Τέμνουσας	50
4.7.1.1	Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Li et al.	50
4.7.1.2	Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Babaie et al.	52
4.7.1.3	Η MBFGS Εξίσωση της Τέμνουσας	54
4.7.2	Τροποποίηση των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων για την Εξασφάλιση Επαρκούς Μείωσης	55
5	Η BFGS Ενημέρωση Ελάχιστης Μνήμης	57
5.1	Εισαγωγή	57
5.2	Το Χαρακτηριστικό Πολυώνυμο της BFGS Ενημέρωσης Ελάχιστης Μνήμης	58
5.3	Ο Πίνακας $(B_{k+1} + \mu I)^{-1}$	59
5.4	Τα Ιδιοδιανύσματα των Ακραίων Ιδιοτιμών	60
III	Νέες Μέθοδοι Βελτιστοποίησης Χωρίς Περιορισμούς	61
6	Μέθοδος MP^+-CG για Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς	63
6.1	Εισαγωγή	63
6.2	Ο Αλγόριθμος MP^+ -CG	64
6.3	Σύγκλιση του Αλγορίθμου MP -CG για Αυστηρά Κυρτές Συναρτήσεις	65
6.4	Σύγκλιση του Αλγορίθμου MP^+ -CG για μη Κυρτές Συναρτήσεις	67
6.5	Αριθμητικά Αποτελέσματα	70
6.6	Συμπεράσματα	76

7 Μέθοδος MDL⁺-CG για Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς	77
7.1 Εισαγωγή	77
7.2 Ο Αλγόριθμος MDL ⁺ -CG	78
7.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MDL-CG για Αυστηρά Κυρτές Συναρτήσεις	79
7.4 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MDL ⁺ -CG για μη Κυρτές Συναρτήσεις	81
7.5 Αριθμητικά Αποτελέσματα	85
7.6 Συμπεράσματα	98

IV Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα 99

8 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	101
8.1 Κίνητρα Ανάπτυξης των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	102
8.2 Ιστορική Αναδρομή	103
8.3 Από τα Βιολογικά στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	104
8.4 Αρχιτεκτονικές Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	105
8.4.1 Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητών Νευρωνικά Δίκτυα Ενός Επιπέδου	105
8.4.2 Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Πολλαπλών Επι- πέδων	106
8.4.3 Ανατροφοδοτούμενα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	107
8.5 Εφαρμογές των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	108
9 Εκπαίδευση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	111
9.1 Διαδικασίες Εκπαίδευσης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	111
9.1.1 Εκπαίδευση Διόρθωσης-Σφάλματος	112
9.1.2 Εκπαίδευση με Επίβλεψη	113
9.1.3 Εκπαίδευση χωρίς Επίβλεψη	114
9.2 Εκπαίδευση Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	114
9.2.1 Ο Αλγόριθμος Backpropagation	116
9.3 Εκπαίδευση Ανατροφοδοτούμενων Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	118
9.3.1 Ο Αλγόριθμος Backpropagation Through Time	119

V Νέες Μέθοδοι Εκπαίδευσης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων 121

10 Μέθοδος DSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	123
10.1 Εισαγωγή	123
10.2 Αλγόριθμος DSP-CG	125
10.2.1 Παραλλαγές του Αλγορίθμου DSP	126
10.3 Αποτίμηση του Αλγορίθμου DSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	127
10.3.1 Αποτίμηση του Αλγορίθμου DSP-CG για την Εκπαίδευση Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Νευρωνικών Δικτύων	127
10.3.1.1 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας	127
10.3.1.2 Το Πρόβλημα Fisher's Iris	128
10.3.1.3 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία	128

10.3.1.4 Το Πρόβλημα E.coli	129
10.3.1.5 Το Πρόβλημα Yeast	130
10.3.2 Αποτίμηση του Αλγορίθμου DSP για την Εκπαίδευση Ανατροφοδοτού- μενων Νευρωνικών Δικτύων	130
10.3.2.1 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας	130
10.3.2.2 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία	131
10.3.2.3 Το Πρόβλημα E.coli	132
10.4 Συμπεράσματα	133
11 Μεθόδος MSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	135
11.1 Εισαγωγή	135
11.2 Ο Αλγόριθμος MSP-CG	136
11.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MSP-CG	137
11.4 Επιλογή της Φασματικής Παραμέτρου	140
11.5 Αποτίμηση του Αλγορίθμου MSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	141
11.5.1 Το Πρόβλημα του Διαβήτη	142
11.5.2 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία	143
11.5.3 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας	143
11.5.4 Το Πρόβλημα Yeast	144
11.5.5 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar	144
11.6 Αποτίμηση της Ικανότητας Γενίκευσης των Εκπαιδευόμενων Νευρωνικών Δι- κτύων με τον Αλγόριθμο MSP-CG	145
11.7 Συμπεράσματα	145
12 Μεθόδος MPR-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	147
12.1 Εισαγωγή	147
12.2 Αλγόριθμος MPR-CG	148
12.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MPR-CG	149
12.4 Αποτίμηση του Αλγορίθμου MPR-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	151
12.4.1 Το Πρόβλημα του Διαβήτη	151
12.4.2 Το Πρόβλημα Fisher's Iris	152
12.4.3 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar	153
12.4.4 Πρόβλημα E.coli	153
12.4.5 Πρόβλημα Yeast	154
12.5 Αποτίμηση της Ικανότητας Γενίκευσης των Εκπαιδευόμενων Νευρωνικών Δι- κτύων με τον Αλγόριθμο MPR-CG	154
12.6 Συμπεράσματα	155
13 Αλγόριθμος CM-BFGS για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	157
13.1 Το Ζεύγος Κατευθύνσεων Μείωσης	157
13.2 Η Περίπτωση του Θετικά Ορισμένου Πίνακα	158
13.3 Η Περίπτωση του Αόριστου Πίνακα	159
13.4 Ο Αλγόριθμος CM-BFGS	160
13.5 Εφαρμογή του Αλγορίθμου CM-BFGS για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	162

13.5.1 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Μαστού	162
13.5.2 Το Πρόβλημα του Διαβήτη	163
13.5.3 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας	164
13.5.4 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πίστωσης στην Αυστραλία	164
13.5.5 Το Πρόβλημα E.coli	165
13.5.6 Το Πρόβλημα Yeast	165
13.6 Εφαρμογή του Αλγόριθμου CM-BFGS για την Κατηγοριοποίηση Βιοϊατρικών Δεδομένων Μεγάλης Διάστασης	166
13.7 Συμπεράσματα	169
VI Συμπεράσματα - Παραρτήματα - Ευρετήριο - Βιβλιογραφία	171
14 Συμπεράσματα Διατριβής	173
A Προβλήματα Κατηγοριοποίησης από τη Βάση Δεδομένων UCI	175
A.1 Το Πρόβλημα Fisher's Iris	175
A.2 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Μαστού	175
A.3 Το Πρόβλημα του Διαβήτη	175
A.4 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πίστωσης στην Αυστραλία	176
A.5 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας	176
A.6 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar	176
A.7 Το Πρόβλημα E.coli	177
A.8 Το Πρόβλημα Yeast	177
B Προβλήματα Κατηγοριοποίησης Βιοϊατρικών Δεδομένων Μεγάλης Διάστασης	179
B.1 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Όρθου	179
B.2 Το Πρόβλημα του Διάχυτου Λέμφωματος B-Κυττάρων	179
B.3 Το Πρόβλημα των Πνευμονικών Αδενοκαρκινώματων	179
B.4 Το Πρόβλημα των Όγκων του Κεντρικού Νευρικού Συστήματος	180
B.5 Το Πρόβλημα του Προστάτη	180
Ευρετήριο Ελληνικών Όρων	181
Ευρετήριο Αγγλικών Όρων	185
Κατάλογος Δημοσιεύσεων	189
Βιβλιογραφία	191

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Παραδείγματα τοπικού και ολικού ελαχιστοποιητή σε μία διάσταση	22
6.1	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών	74
6.2	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των υπολογισμών των κλίσεων	75
6.3	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων	75
6.4	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον υπολογιστικό χρόνο	76
7.1	Ποσοστό επιτυχίας του Αλγορίθμου MDL^+ -CG για κάθε τιμή της παραμέτρου t	86
7.2	Πολυγράφημα με τη μέση τιμή των συναρτησιακών υπολογισμών (μπλέ γραμμή) και με τη μέση τιμή των υπολογισμών των κλίσεων (κόκκινη γραμμή). . .	86
7.3	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, MDL_1^+ , MDL_2^+ και MDL_3^+ ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς	97
7.4	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, MDL_1^+ , MDL_2^+ και MDL_3^+ ως προς τους υπολογισμούς των κλίσεων	97
8.1	Εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο ενός επιπέδου	105
8.2	Εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο πολλαπλών επιπέδων	106
8.3	Ανατροφοδοτούμενο δίκτυο χωρίς βρόγχους αυτοανάδρασης και κρυφούς νευρώνες	107
8.4	Ανατροφοδοτούμενο δίκτυο με κρυφούς νευρώνες τύπου Elman	108
9.1	Διάγραμμα ροής εκπαίδευσης με επίβλεψη	114
9.2	Γραφική αναπαράσταση της διαδικασίας του αλγορίθμου της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος	116
9.3	Τύποι ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων	119
10.1	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας	128
10.2	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα iris	128
10.3	Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα της πιστωτικής έγκρισης στην Αυστραλία	129

10.4 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP ₁ ⁺ και DSP ₂ ⁺ για το πρόβλημα e.coli	129
10.5 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP ₁ ⁺ και DSP ₂ ⁺ για το πρόβλημα yeast	130
10.6 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP ₁ ⁺ και DSP ₂ ⁺ για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας	131
10.7 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP ₁ ⁺ και DSP ₂ ⁺ για το πρόβλημα της πιστωτικής έγκρισης στην Αυστραλία	132
10.8 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP ₁ ⁺ και DSP ₂ ⁺ για το πρόβλημα e.coli	133
11.1 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα του διαβήτη	142
11.2 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα της πιστωτικής έγκρισης στην Αυστραλία	143
11.3 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας	143
11.4 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα yeast	144
11.5 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar	144
12.1 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα του διαβήτη	152
12.2 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα iris	152
12.3 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar	153
12.4 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα e.coli.	153
12.5 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα yeast.	154
13.1 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του καρκίνου του μαστού	163
13.2 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του διαβήτη	163
13.3 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας	164
13.4 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα της έγκρισης πίστωσης στην Αυστραλία.	164
13.5 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα e.coli.	165
13.6 Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα yeast.	166

Κατάλογος Αλγορίθμων

3.1	Αλγόριθμος Γραμμικής Αναζήτησης	30
6.1	Αλγόριθμος MP-CG	64
6.2	Αλγόριθμος MP^+ -CG	65
7.1	Αλγόριθμος MDL-CG	78
7.2	Αλγόριθμος MDL^+ -CG	78
10.1	Αλγόριθμος DSP-CG	125
10.2	Αλγόριθμος DSP_1^+ -CG	126
10.3	Αλγόριθμος DSP_2^+ -CG	126
11.1	Αλγόριθμος MSP-CG	137
12.1	Αλγόριθμος MPR-CG	148
13.1	Αλγόριθμος CM-BFGS	161

Κατάλογος Πινάκων

6.1	Συλλογή προβλημάτων της CuteR και οι διαστάσεις τους	71
6.2	Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων CG-Descend, PR+ και MP+	74
7.1	Κατάλογος προβλημάτων από τη συλλογή προβλημάτων του Andrei	85
7.2	Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων CG-Descend και MDL_1^+ -CG	92
7.3	Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων MDL_2^+ -CG και MDL_3^+ -CG	96
11.1	Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τις μεθόδους SP, DSP, MSP και AMSP	145
12.1	Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τις μεθόδους PR, PR+, DPR και MPR	154
13.1	Αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων	167
13.2	Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τη CM-BFGS μέθοδο.	168
13.3	Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας την BFGS μέ- θοδο	168

Μέρος Ι

Εισαγωγή και Βασικές Έννοιες

Εισαγωγή

Η φύση βελτιστοποιεί. Τα φυσικά συστήματα τείνουν προς την κατάσταση προς την οποία ελαχιστοποιείται η ενέργεια. Τα μόρια σε ένα απομονωμένο σύστημα χημικής αντίδρασης αλληλεπιδρούν μέχρι ότου ελαχιστοποιηθεί το συνολικό ενεργειακό δυναμικό των ηλεκτρονίων τους. Οι ακτίνες του φωτός ακολουθούν μονοπάτια, τα οποία ελαχιστοποιούν το χρόνο του ταξιδιού τους.

Οι άνθρωποι βελτιστοποιούν. Οι επενδυτές επιδιώκουν τη δημιουργία χαρτοφυλακίων για την αποφυγή του υψηλού κινδύνου ενώ παράλληλα ευελπιστούν να μεγιστοποιήσουν το ποσοστό της απόδοσης. Οι κατασκευαστές στοχεύουν στη μέγιστη απόδοση, βελτιστοποιώντας το σχεδιασμό και τη λειτουργία της διαδικασίας παραγωγής. Οι μηχανικοί ρυθμίζουν τις παραμέτρους έτσι ώστε να βελτιστοποιείται η απόδοση των σχεδίων τους.

Η *βελτιστοποίηση* (optimization) είναι ένας νέος κλάδος των Μαθηματικών ο οποίος έχει εφαρμοστεί με επιτυχία σε πολλά επιστημονικά πεδία, όπως στις φυσικές επιστήμες, στην οικονομία και τη μηχανική, καθώς και σε θέματα που αφορούν στρατιωτικές και διαστημικές τεχνολογίες και εφαρμογές. Αν και η βελτιστοποίηση χρονολογείται από πολύ παλιά, δεν αποτελούσε ανεξάρτητο πεδίο έρευνας μέχρι τα τέλη του 1940, όπου ο G.B. Dantzig [34] παρουσίασε τον γνωστό αλγόριθμο simplex για προβλήματα γραμμικού προγραμματισμού. Στα τέλη της δεκαετίας του '50, η θεμελίωση και η εφαρμογή των μεθόδων συζυγών κλίσεων καθώς και των Quasi-Newton μεθόδων, αποτέλεσε εφιαλτήριο ανάπτυξης του μη γραμμικού προγραμματισμού, ως ανεξάρτητο πεδίο έρευνας. Αξίζει να τονίσουμε ότι δεν υπάρχει καθολικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης αλλά μία συλλογή αλγορίθμων κάθε ένας από τους οποίους στοχεύει στην επίλυση συγκεκριμένου τύπου προβλημάτων βελτιστοποίησης.

Η εξέλιξη της επιστήμης και της τεχνολογίας κάνει επιτακτική την ανάγκη για ανάπτυξη ολοένα και πιο αποδοτικών αλγορίθμων βελτιστοποίησης που μπορούν να επιλύουν τα προβλήματα που εμφανίζονται συνεχώς σε διάφορες εφαρμογές, γρήγορα και με μικρό υπολογιστικό κόστος. Στις μέρες μας, υπάρχουν μέθοδοι βελτιστοποίησης που μπορούν να λύσουν δύσκολα και μεγάλης κλίμακας προβλήματα, με αποτέλεσμα η βελτιστοποίηση να αποτελεί απαραίτητο εργαλείο σε διάφορους τομείς της επιστήμης. Η θεωρία και οι μέθοδοι βελτιστοποίησης ασχολούνται με την εύρεση της βέλτιστης λύσης προβλημάτων που αναπαρίστανται μέσω ενός μαθηματικού μοντέλου (αιτιοκρατικό ή στοχαστικό). Η ανάπτυξη του μοντέλου αποσκοπεί στην μετατροπή όλων των βασικών συνιστωσών του προβλήματος σε μαθηματικές ή/και λογικές σχέσεις. Οι πιο βασικές συνιστώσες είναι η αντικειμενική συνάρτηση και οι άγνωστοι ή μεταβλητές, ενώ πολλές φορές υπάρχει κι ένα σύνολο περιορισμών.

1.1 Το Πρόβλημα της Βελτιστοποίησης

Ο όρος βελτιστοποίηση ανταποκρίνεται στην περίπτωση της *ελαχιστοποίησης* (minimization) ή της *μεγιστοποίησης* (maximization). Οι δύο αυτές περιπτώσεις είναι ισοδύναμες, καθώς ένα ελάχιστο μίας συνάρτησης f , αποτελεί ένα μέγιστο της $-f$ και αντίστροφα. Συνεπώς, με μία απλή αλλαγή πρόσημου μπορούμε να μετατρέπουμε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης σε ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης και αντίστροφα. Γι' αυτό το λόγο και χωρίς την απώλεια της γενικότητας στη συνέχεια της διατριβής με τον όρο βελτιστοποίηση θα εννοούμε την ελαχιστοποίηση μίας αντικειμενικής συνάρτησης f .

Ορισμός 1.1. (Το Πρόβλημα της Βελτιστοποίησης). Η γενική μαθηματική έκφραση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς είναι η ακόλουθη :

$$\min_{x \in \mathcal{D}} f(x) \quad (1.1)$$

όπου $x \in \mathbb{R}^n$ είναι το διάνυσμα των μεταβλητών (variables), $f(x)$ είναι η αντικειμενική συνάρτηση (objective function) και $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ είναι η εφικτή περιοχή (feasible region) που προκύπτει από το σύνολο των περιορισμών του προβλήματος.

Στην περίπτωση όπου η εφικτή περιοχή είναι όλο το $\mathbb{R}^n$, δηλαδή $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$, το πρόβλημα βελτιστοποίησης (2.7) ονομάζεται *πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς* (unconstrained optimization).

Ορισμός 1.2. (Το Πρόβλημα της Βελτιστοποίησης χωρίς Περιορισμούς). Η γενική μορφή ενός προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς είναι η ακόλουθη :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x). \quad (1.2)$$

Στην αντίθετη περίπτωση, όπου $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$, το πρόβλημα βελτιστοποίησης (2.7) ονομάζεται πρόβλημα *προβλήμα βελτιστοποίησης με περιορισμούς* (constrained optimization).

Ορισμός 1.3. (Το Πρόβλημα της Βελτιστοποίησης με Περιορισμούς). Η γενική μορφή ενός προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς είναι η ακόλουθη :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \quad \text{υπό τους περιορισμούς} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E}; \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I}, \end{cases}$$

όπου $c_i(x)$ είναι η διανυσματική μορφή των περιορισμών (constraints) τις οποίες πρέπει να ικανοποιούν οι μεταβλητές, $\mathcal{E}$ και $\mathcal{I}$ είναι τα σύνολα των δεικτών των περιορισμών ισότητας (equalities) και περιορισμών ανισότητας (inequalities), αντίστοιχα με $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$.

Όταν τόσο η αντικειμενική συνάρτηση $f(x)$, όσο και οι περιορισμοί $c_i(x)$ είναι γραμμικές συναρτήσεις, τότε το πρόβλημα βελτιστοποίησης ονομάζεται *γραμμικό* (linear optimization problem) ενώ σε αντίθετη περίπτωση ονομάζεται *μη γραμμικό* (nonlinear optimization problem).

Οι αλγόριθμοι επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης μπορούν να ταξινομηθούν σε δύο κατηγορίες, τους *τοπικούς* (local optimization algorithm) και τους *ολικούς* (global optimization algorithm). Τοπικοί είναι οι αλγόριθμοι, οι οποίοι εγγυώνται την εύρεση ενός τοπικού ελαχιστοποιητή της αντικειμενικής συνάρτησης από ένα αρχικό σημείο [31, 102, 124, 150]. Αντίθετα οι ολικοί αλγόριθμοι εγγυώνται τον υπολογισμό ενός ολικού ελαχιστοποιητή της αντικειμενικής συνάρτησης, ανεξαρτήτως του αρχικού σημείου [65, 66, 107]. Ωστόσο σε μερικά βιβλία (για π.χ. [37]), οι ολικοί αλγόριθμοι ορίζονται ως οι αλγόριθμοι που μπορούν να εντοπίσουν ένα (τοπικό) ελαχιστοποιητή ανεξάρτητα από το αρχικό σημείο. Οι αλγόριθμοι αυτοί είναι γνωστοί και ως αλγόριθμοι *ευρείας σύγκλισης* (global convergent algorithm) και αποδεικνύεται ότι, με την κατάλληλη επιλογή του αρχικού σημείου, μπορούν να εντοπίσουν έναν ολικό ελαχιστοποιητή, χωρίς ωστόσο να υπάρχει αξιόπιστος κανόνας επιλογής του σημείου [37].

Εν γένει, για την επίλυση του προβλήματος (2.7) εφαρμόζονται επαναληπτικές διαδικασίες (αλγόριθμοι) οι οποίες ξεκινούν με μία αρχική εκτίμηση της λύσης και δημιουργούν μία ακολουθία από συνεχώς βελτιωμένες εκτιμήσεις της, έως ότου φτάσουν στη βέλτιστη λύση. Κάθε τέτοιος αλγόριθμος θα πρέπει να εγγυάται ότι η ακολουθία των επαναλήψεων που δημιουργούνται από αυτόν, συγκλίνει στη βέλτιστη λύση του εκάστοτε προβλήματος. Αυτή η απαίτηση ικανοποιείται μέσω της θεωρίας σύγκλισης της μαθηματικής μεθόδου που υλοποιεί ο αλγόριθμος. Ο έλεγχος βελτιστότητας της παραγόμενης λύσης επιτυγχάνεται εφόσον ικανοποιούνται ικανές και αναγκαίες συνθήκες, γνωστές ως *συνθήκες βελτιστότητας* (optimality conditions). Επιπλέον, η μη ικανοποίηση των συνθηκών βελτιστότητας στην τρέχουσα επανάληψη, συνάγει χρήσιμες πληροφορίες για τον εκάστοτε αλγόριθμο προκειμένου να βελτιώσει την τρέχουσα εκτίμηση της λύσης.

Η στρατηγική που χρησιμοποιείται για την αναζήτηση της βέλτιστης λύσης ανά επανάληψη, χαρακτηρίζει το είδος του αλγορίθμου (π.χ. γραμμική αναζήτηση, καμπυλόγραμμη αναζήτηση, κτλ.). Η πλειονότητα των στρατηγικών αναζήτησης χρησιμοποιούν τις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης, των περιορισμών, αν υπάρχουν, και πιθανώς της πρώτης και δεύτερης τάξης παραγώγου, προκειμένου να ορίσουν το επόμενο σημείο της ακολουθίας των επαναλήψεων. Επίσης, πρέπει να σημειωθεί ότι μερικοί αλγόριθμοι χρησιμοποιούν πληροφορία καμπυλότητας της αντικειμενικής συνάρτησης από προηγούμενες επαναλήψεις (π.χ. μέθοδοι συζυγών κλίσεων, Quasi-Newton μέθοδοι, κ.α.), προκειμένου να προσδιορίσουν την κατεύθυνση αναζήτησής τους, εντός του εφικτού χωρίου $\mathcal{D}$.

1.2 Περίληψη της Διατριβής

Η παρούσα διατριβή χωρίζεται σε έξι μέρη.

Το Μέρος I αποτελείται από δύο κεφάλαια. Στο Κεφάλαιο 1 δίνεται η παρούσα εισαγωγή στη διατριβή. Στο Κεφάλαιο 2 δίνεται το απαραίτητο μαθηματικό υπόβαθρο παραθέτοντας τις βασικές έννοιες της γραμμικής άλγεβρας και της πραγματικής ανάλυσης, οι οποίες είναι

απαραίτητες για την μελέτη των μεθόδων που θα παρουσιάσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

Στο Μέρος II παρατίθενται οι βασικές ιδέες και στρατηγικές της βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 3, παρουσιάζονται συνοπτικά οι πιο γνωστές μέθοδοι βελτιστοποίησης, όπως η μέθοδος Newton, οι περιορισμένης μνήμης Quasi-Newton μέθοδοι, οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων και οι μέθοδοι γραμμικής και καμπυλόγραμμης αναζήτησης. Στο Κεφάλαιο 4, παρουσιάζονται οι μέθοδοι μη γραμμικών συζυγών κλίσεων δίνοντας ιδιαίτερη έμφαση στα πλεονεκτήματά τους και στις ιδιότητες σύγκλισής αυτών των μεθόδων, καθώς αποτελούν το κύριο ερευνητικό ενδιαφέρον της παρούσας διατριβής. Επίσης, ιδιαίτερη μνεία γίνεται στις κατευθύνσεις προς τις οποίες κινείται η έρευνα για την ανάπτυξη νέων μεθόδων συζυγών κλίσεων. Στο Κεφάλαιο 5, παρατίθεται η BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης λόγω της σπουδαιότητας που παρουσιάζει στους αλγορίθμους βελτιστοποίησης. Παρουσιάζονται θεωρήματα αναφορικά με το χαρακτηριστικό πολυώνυμο, των αριθμό των διακριτών ιδιοτιμών και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων της BFGS ενημέρωσης ελάχιστης μνήμης και εξάγονται κλειστοί τύποι για τον υπολογισμό των ανωτέρω ποσοτήτων, αποφεύγοντας πλήρως την αποθήκευση και την παραγοντοποίηση πινάκων.

Στο Μέρος III παρουσιάζονται δύο νέες μέθοδοι βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 6, παρουσιάζουμε μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία βασίζεται στην MBFGS εξίσωση της τέμνουσας, τροποποιώντας τη μέθοδο του Perry. Στο Κεφάλαιο 7, παρουσιάζουμε μία νέα μέθοδος συζυγών κλίσεων, η οποία αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Dai-Liao. Η νέα μέθοδος βασίζεται σε μία νέα εξίσωση της τέμνουσας, η οποία προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης. Δύο σημαντικές ιδιότητες και των δύο προτεινόμενων μεθόδων είναι ότι εγγυώνται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και συγκλίνουν ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Για να αξιολογηθεί η αποδοτικότητα των προτεινόμενων μεθόδων, χρησιμοποιούνται τα προφίλ απόδοσης, από τα οποία γίνεται σαφής η υπεροχή των προτεινόμενων μεθόδων έναντι των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων.

Οι μη γραμμικές μέθοδοι συζυγών κλίσεων εκτός από την αριθμητική βελτιστοποίηση μπορούν να χρησιμοποιηθούν και ως μέθοδοι εκπαίδευσης τεχνητών νευρωνικών δικτύων και γι' αυτό το Μέρος IV της διατριβής είναι αφιερωμένο στα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 8, περιγράφουμε αναλυτικά τη δομή και τη λειτουργία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και παρουσιάζουμε μία σύντομη ιστορική αναδρομή. Στη συνέχεια, αναφέρουμε μερικά από τα πλεονεκτήματα της χρήσης των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και συνοψίζουμε τους κύριους τομείς εφαρμογής τους. Στο Κεφάλαιο 9, παρουσιάζουμε τις βασικές κατηγορίες μεθόδων εκπαίδευσης δίνοντας έμφαση στις μεθόδους εκπαίδευσης με επίβλεψη. Επίσης, ιδιαίτερη μνεία γίνεται στη μέθοδο της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος και στη παρουσίαση της εκπαίδευσης ενός τεχνητού (εμπρόσθιου ή ανατροφοδοτούμενου) νευρωνικού δικτύου ως ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

Στο Μέρος V παρατίθενται νέες μέθοδοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων. Στα Κεφάλαια 10, 11 και 12 παρουσιάζονται νέες μέθοδοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων, οι οποίες ανήκουν στην κλάση μεθόδων συζυγών κλίσεων. Τα θεωρητικά πλεονεκτήματα των μεθόδων είναι η εξασφάλιση επαρκούς μείωσης ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και η εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις. Οι νέες μέθοδοι εφαρμόστηκαν

σε προβλήματα κατηγοριοποίησης από το πεδίο της τεχνητής νοημοσύνης και της βιοπληροφορικής. Στο Κεφάλαιο 13, παρουσιάζουμε έναν νέο αλγόριθμο BFGS ελαχίστης μνήμης για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων, ο οποίος βασίζεται σε μία καμπυλόγραμμη αναζήτηση. Η μέθοδος χρησιμοποιεί την BFGS ενημέρωση ελαχίστης μνήμης για τον υπολογισμό των κατευθύνσεων μείωσης, ο οποίος αντλεί πληροφορία από την ιδιοσύνθεση του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα, αποφεύγοντας οποιαδήποτε αποθήκευση ή παραγοντοποίηση πίνακα. Ο αλγόριθμος εφαρμόζεται σε προβλήματα πολύ μεγάλης κλίμακας από τη βιοιατρική και τη βιοπληροφορική.

Το τελευταίο μέρος της διατριβής αποτελείται από ένα παράρτημα με τα προβλήματα αξιολόγησης των αλγορίθμων εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στα Κεφάλαια 9-13, το ευρετήριο ελληνικών και αγγλικών όρων και τη βιβλιογραφία.

Μαθηματικό Υπόβαθρο

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρατίθενται οι βασικές έννοιες της γραμμικής άλγεβρας και της πραγματικής ανάλυσης, οι οποίες είναι απαραίτητες για την μελέτη των μεθόδων που θα παρουσιάσουμε στα επόμενα κεφάλαια. Οι έννοιες αυτές αποτελούν τα θεμελιώδη εργαλεία για την ανάλυση και την υλοποίηση των μεθόδων και χρησιμοποιούνται στη θεωρία σύγκλισης των μεθόδων. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [12, 52, 68, 130].

2.1 Πίνακες και Διανύσματα

Στη συνέχεια της διπλωματικής εργασίας το σύμβολο $\mathbb{R}^n$ θα υποδηλώνει τον πραγματικό Ευκλείδειο n -διάστατο χώρο.

Ορισμός 2.1. (Πίνακας). Μία ορθογώνια διάταξη, η οποία αποτελείται από m γραμμές και n στήλες και πλήθος στοιχείων $m \cdot n$ ονομάζεται *πίνακας* (matrix). Ένας πραγματικός πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, διάστασης $m \times n$ μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Στη βιβλιογραφία, συνήθως οι πίνακες συμβολίζονται με ένα κεφαλαίο γράμμα, π.χ. A και το (i, j) στοιχείο τους συμβολίζεται με το αντίστοιχο μικρό γράμμα και το δείκτη ij , δηλαδή a_{ij} .

Ένας πίνακας, του οποίου ο αριθμός των γραμμών είναι ίσος με τον αριθμό των στηλών, ονομάζεται *τετραγωνικός* (square matrix). Ένας τετραγωνικός πίνακας A διάστασης $n \times n$ για τον οποίο ισχύει ότι $a_{ij} = 0$ για κάθε $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ με $i \neq j$ ονομάζεται *διαγώνιος*

(diagonal matrix) και συμβολίζεται ως

$$A = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}) = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Προφανώς όλα τα στοιχεία εκτός της κύριας διαγωνίου είναι μηδενικά και τουλάχιστον ένα στοιχείο της κύριας διαγωνίου είναι μη μηδενικό. Στη βιβλιογραφία, ίσως ο πιο διάσημος διαγώνιος πίνακας είναι ο μοναδιαίος πίνακας. Συγκεκριμένα, ένας διαγώνιος πίνακας του οποίου όλα τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου είναι ίσα με τη μονάδα ονομάζεται *μοναδιαίος πίνακας* (identity matrix) και συμβολίζεται με I . Επίσης, συνηθίζεται ο μοναδιαίος πίνακας διάστασης $n \times n$, να συμβολίζεται ως I_n . Ένας πίνακας ονομάζεται *κάτω(άνω) τριγωνικός* (lower(upper) triangular matrix) αν όλα τα στοιχεία που βρίσκονται πάνω(κάτω) από την κύρια διαγώνιο είναι μηδενικά. Ολοφάνερα ένας διαγώνιος πίνακας είναι ταυτόχρονα και άνω και κάτω τριγωνικός.

Ο *αντίστροφος* (inverse matrix) ενός τετραγωνικού πίνακας A (αν υπάρχει), ο οποίος συμβολίζεται με A^{-1} είναι ένας πίνακας τέτοιος ώστε $AA^{-1} = A^{-1}A = I$. Έστω ένας πίνακας A διάστασης $m \times n$, τότε ο *ανάστροφος* (transpose matrix) του πίνακα A , είναι ένας πίνακας διάστασης $n \times m$, ο οποίος προκύπτει από την αντιστροφή των στηλών του A με τις γραμμές του και συμβολίζεται ως A^T .

Ορισμός 2.2. (Ορθογώνιος Πίνακας). Ένας τετραγωνικός πίνακας A ονομάζεται *ορθογώνιος* (orthogonal matrix) αν $AA^T = A^T A = I$.

Ορισμός 2.3. (Συμμετρικός Πίνακας). Ένας τετραγωνικός πίνακας ονομάζεται *συμμετρικός* (symmetric matrix) αν και μόνο αν $A = A^T$.

Ίσως οι πιο σημαντική κατηγορία πινάκων είναι αυτή των θετικά ή αρνητικά ορισμένων πινάκων, όχι μόνο εξαιτίας των ιδιαίτερα χρήσιμων ιδιοτήτων τους αλλά και εξαιτίας της συχνής εμφάνισής τους στη μοντελοποίηση πραγματικών προβλημάτων.

Ορισμός 2.4. (Θετικά/Αρνητικά Ορισμένος Πίνακας). Έστω ένας συμμετρικός πίνακας A , διάστασης $n \times n$. Ο πίνακας A ονομάζεται *θετικά ορισμένος* (positive definite), αν για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ ισχύει ότι $x^T A x > 0$. Ομοίως, ένας πίνακας A ονομάζεται *αρνητικά ορισμένος* (negative definite), αν για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ ισχύει ότι $x^T A x < 0$.

Ορισμός 2.5. (Ημιθετικά/Ημιαρνητικά Ορισμένος Πίνακας). Έστω ένας συμμετρικός πίνακας A , διάστασης $n \times n$. Ο πίνακας A ονομάζεται *ημιθετικά ορισμένος* (semipositive definite), αν για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ ισχύει ότι $x^T A x \geq 0$. Ομοίως, ένας πίνακας A ονομάζεται *ημιαρνητικά ορισμένος* (seminegative definite), αν για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ ισχύει ότι $x^T A x \leq 0$.

Προφανώς αν ο A είναι θετικά ορισμένος ή θετικά ημιορισμένος, τότε ο πίνακας $-A$ είναι αρνητικά ορισμένος ή αρνητικά ημιορισμένος, αντίστοιχα. Αν ο πίνακας A δεν είναι ούτε θετικά και ούτε αρνητικά ημιορισμένος, τότε ονομάζεται *αόριστος* (indefinite matrix).

Ένας τετραγωνικός πίνακας A ονομάζεται *ταυτοδύναμος* (idempotent) αν $A^2 = A$. Δοθέντος ενός διανύσματος $x \in \mathbb{R}^n$, μία *προβολή* (projection) του x στον υποχώρο $V \subseteq \mathbb{R}^n$ είναι ο γραμμικός μετασχηματισμός του x στο V . Το διάνυσμα που προκύπτει από την προβολή του διανύσματος x στον V , συμβολίζεται ως Px , όπου P είναι ο *πίνακας μετασχηματισμού* (transformation matrix). Δοθέντος της προβολής Px στο V , μία ακόμα προβολή του διανύσματος Px στο χώρο V δεν έχει επίπτωση στο διάνυσμα Px , δηλαδή

$$P(Px) = P^2x = Px.$$

Γι' αυτό το λόγο, ένας πίνακας P ονομάζεται *πίνακας προβολής* (projection matrix) αν είναι ταυτοδύναμος.

Μία προβολή του x στο V ονομάζεται *ορθογώνια* (orthogonal projection) αν η προβολή Px είναι ορθογώνια με τη διαφορά των διανυσμάτων x και Px , δηλαδή

$$(x - Px)^T Px = x^T (I - P)^T Px = 0. \quad (2.1)$$

Προφανώς η παραπάνω σχέση (2.1) ισχύει για κάθε διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$, από το οποίο αποκομίζουμε ότι $(I - P)^T P = 0$, το οποίο συνεπάγεται ότι $P = P^T P = P^T$. Συνεπώς ο πίνακας P είναι συμμετρικός. Γι' αυτό ένας πίνακας ονομάζεται *πίνακας ορθογώνιου μετασχηματισμού* (orthogonal projection matrix) αν και μόνο αν είναι συμμετρικός και ταυτοδύναμος. Αξίζει να τονίσουμε ότι πολύ εύκολα μπορεί να αποδειχθεί ότι η ορθογώνια προβολή Px είναι μοναδική.

Αν ένας πίνακας P είναι ένας πίνακας ορθογώνιου μετασχηματισμού τότε ο πίνακας $I - P$ είναι ταυτοδύναμος, γιατί

$$(I - P)^2 = I^2 - 2IP + P^2 = I - P.$$

Εφόσον ο πίνακας $I - P$ είναι ένας συμμετρικός πίνακας οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι ο πίνακας $I - P$ είναι πίνακας ορθογώνιου μετασχηματισμού. Επίσης από τη σχέση (2.1), έχουμε ότι $(I - P)^T P = 0$, το οποίο συνεπάγεται ότι τα διανύσματα Px και $(I - P)x$ είναι ορθογώνια. Έτσι καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι κάθε διάνυσμα x μπορεί να γραφτεί σαν γραμμικός συνδυασμός δύο ορθογώνιων συνιστωσών:

$$x = Px + (I - P)x.$$

Στη συνέχεια της ενότητας, θα παρουσιάσουμε τον ορισμό του διανύσματος (vector) και κάποιες θεμελιώδεις έννοιες τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε ευρέως στη συνέχεια. Ένας $n \times 1$ πίνακας ονομάζεται *n-διάστατο διάνυσμα στήλη* (column vector) και ένας $1 \times n$ πίνακας ονομάζεται *n-διάστατο διάνυσμα γραμμή* (row matrix). Στη συνέχεια της εργασίας θα ασχοληθούμε με τα διανύσματα στήλη, τα οποία θα αποκαλούμε απλώς διανύσματα.

Ορισμός 2.6. (Γραμμικώς Ανεξάρτητα/Εξαρτημένα Διανύσματα). Έστω το σύνολο των διανυσμάτων $x_1, x_2, \dots, x_m \in \mathbb{R}^n$. Τα διανύσματα αυτά ονομάζονται *γραμμικώς ανεξάρτητα* (linear independent) αν η σχέση

$$k_1 x_1 + k_2 x_2 + \dots + k_m x_m = 0, \quad \text{με } k_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, m,$$

ικανοποιείται αν και μόνο αν $k_1 = k_2 = \dots = k_m = 0$. Σε αντίθετη περίπτωση τα διανύσματα ονομάζονται *γραμμικώς εξαρτημένα*.

Ορισμός 2.7. (Εσωτερικό Γινόμενο). Έστω τα διανύσματα $x, y \in \mathbb{R}^n$. Το *εσωτερικό γινόμενο* (dot product) των x και y ορίζεται ως

$$x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Όπως θα δούμε και στη συνέχεια αν το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων είναι ίσο με μηδέν, τότε τα διανύσματα ονομάζονται *ορθογώνια* (orthogonal vectors). Οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων, οι οποίοι αποτελούν το αντικείμενο αυτής της διατριβής βασίζονται σε μία πολύ σημαντική ιδιότητα, την ιδιότητα της συζυγίας.

Ορισμός 2.8. (Συζυγή Διανύσματα). Έστω H ένας συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας διάστασης $n \times n$ και $d_1, d_2, \dots, d_m \in \mathbb{R}^n$ μη μηδενικά διανύσματα, με $m \leq n$. Τότε, αν

$$d_i^T H d_j = 0, \quad \forall i, j = \{1, 2, \dots, m\}, \text{ με } i \neq j,$$

τότε τα διανύσματα ονομάζονται *H-συζυγή* ή απλώς *συζυγή διανύσματα* (conjugate vector).

Προφανώς αν τα διανύσματα $d_1, d_2, \dots, d_m$ είναι συζυγή τότε είναι γραμμικώς ανεξάρτητα. Και αν $H = I$ τότε η συζυγία είναι ισοδύναμη με την ορθογωνιότητα.

2.1.1 Νόρμα Πίνακα

Ορισμός 2.9. (Νόρμα Πίνακα). Μία *μετρική* ή *νόρμα* ενός πίνακα A διάστασης $m \times n$ είναι μία πραγματική συνάρτηση από το $\mathbb{R}^{m \times n}$ στο $\mathbb{R}$ με τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $\|A\| \geq 0$ για κάθε $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ και $\|A\| = 0$ αν και μόνο αν $x = 0$.
2. $\|cA\| = |c| \|x\|$ για κάθε $c \in \mathbb{R}$ και $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ για κάθε $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Στη βιβλιογραφία, οι πιο γνωστές νόρμες είναι η Frobenius νόρμα

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$$

και οι l_p -νόρμες

$$\|A\|_p = \max_{\|x\|_p=1} \|Ax\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p},$$

όπου για $p = 1, 2$ και ∞ έχουμε

1. $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|.$
2. $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)},$ όπου $\lambda_{\max}(\cdot)$ είναι η μεγαλύτερη κατά απόλυτη τιμή ιδιοτιμή.
3. $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$

2.1.2 Νόρμα Διανύσματος

Ορισμός 2.10. (Νόρμα Διανύσματος). Μία *μετρική* ή *νόρμα διανύσματος* (norm) $x \in \mathbb{R}^n$ είναι μία πραγματική συνάρτηση από το $\mathbb{R}^n$ στο $\mathbb{R}$ με τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $\|x\| \geq 0$ για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$ και $\|x\| = 0$ αν και μόνο αν $x = 0$.
2. $\|cx\| = |c| \|x\|$ για κάθε $c \in \mathbb{R}$ και $x \in \mathbb{R}^n$.
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ για κάθε $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Πολλοί γνωστές νόρμες είναι οι l_p -νόρμες, οι οποίες για ένα διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ ορίζονται ως εξής:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad \text{με } 1 < p < \infty.$$

Οι πιο ευρέως διαδεδομένες είναι:

1. Η l_1 -νόρμα, $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$.
2. Η l_2 -νόρμα ή *Ευκλείδεια νόρμα*, $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x^T x}$.
3. Η l_∞ -νόρμα, $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$.

Όλες οι μετρικές στον $\mathbb{R}^n$ είναι ισοδύναμες, με την έννοια ότι κάθε μία είναι άνω και κάτω φραγμένη από ένα πολλαπλάσιο των άλλων. Συγκεκριμένα, για τις τρεις παραπάνω νόρμες, ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1, \quad \|x\|_1 \leq \sqrt{n}\|x\|_2 \quad \text{και} \quad \|x\|_2 \leq \sqrt{n}\|x\|_1.$$

Ακόμα, για τη Ευκλείδεια νόρμα ισχύουν τα παρακάτω. Έστω θ η γωνία μεταξύ των διανυσμάτων x και y , με $x, y \in \mathbb{R}^n$. Τότε από το νόμο των συνημιτόνων έχουμε

$$\|x - y\|_2^2 = \|x\|_2^2 + \|y\|_2^2 - 2\|x\|_2 \|y\|_2 \cos \theta$$

Στην περίπτωση όπου $\theta = 90^\circ$ τότε $\|x - y\|_2 = 0$ και τα διανύσματα x και y ονομάζονται *ορθογώνια* (orthogonal vectors). Εφόσον $-1 \leq \cos \theta \leq 1$, μπορούμε αμέσως να αποκομίσουμε την παρακάτω ανισότητα, η οποία είναι γνωστή και ως *ανισότητα Cauchy-Schwarz* (Cauchy-Schwarz inequality).

Ορισμός 2.11. (Ανισότητα Cauchy-Schwarz). Για κάθε διανύσματα $x, y \in \mathbb{R}^n$ ισχύει η ανισότητα

$$|x^T y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2.$$

Η ισότητα ισχύει μόνο αν τα διανύσματα x και y είναι γραμμικώς εξαρτημένα.

Από την ανισότητα Cauchy-Schwarz συνεπάγεται ότι

$$\begin{aligned} \|x + y\|_2^2 &= \|x\|_2^2 + \|y\|_2^2 + 2x^T y \\ &\leq \|x\|_2^2 + \|y\|_2^2 + 2\|x\|_2 \|y\|_2 \\ &= (\|x\|_2 + \|y\|_2)^2, \end{aligned}$$

το οποίο οδηγεί στην *τριγωνική ανισότητα* (triangular inequality).

Ορισμός 2.12. (Τριγωνική Ανισότητα). Για κάθε διανύσματα $x, y \in \mathbb{R}^n$ ισχύει η ανισότητα

$$\|x + y\|_2 \leq \|x\|_2 + \|y\|_2$$

Η ισότητα ισχύει μόνο αν τα διανύσματα x και y είναι γραμμικώς εξαρτημένα.

2.2 Ρυθμός Σύγκλισης

Μία ακολουθία διανυσμάτων $\{x_k\}$ στο $\mathbb{R}^n$ θεωρείται ότι συγκλίνει στο σημείο $x^* \in \mathbb{R}^n$, αν ισχύει ότι

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_k - x^*\| = 0.$$

Επίσης, το σημείο $x^* \in \mathbb{R}^n$ ονομάζεται *σημείο συσσώρευσης* ή *οριακό σημείο* (accumulation point) μίας ακολουθίας $\{x_k\}$, αν υπάρχει μία άπειρη υπακολουθία ακεραίων $k_1, k_2, \dots$ τέτοια ώστε

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_{k_i} = x^*$$

Μία ακολουθία πινάκων $\{A_k\}$ λέμε ότι συγκλίνει στον πίνακα A^* , αν ισχύει ότι

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|A_k - A^*\| = 0.$$

Η μετρική που χρησιμοποιείται δεν παίζει ρόλο στη σύγκλιση ακολουθιών, γιατί όλες οι μετρικές που χρησιμοποιούνται σε πεπερασμένης διάστασης χώρους είναι ισοδύναμες.

Ο *ρυθμός σύγκλισης* (convergence rate) αποτελεί ένα μέτρο εκτίμησης της ταχύτητας σύγκλισης μίας ακολουθίας. Το μαθηματικό αυτό μέτρο υπολογίζει την υπολογιστική αποδοτικότητα ενός επαναληπτικού αλγορίθμου. Ένας από τους πιο αποτελεσματικούς τρόπους αξιολόγησης του ρυθμού σύγκλισης, είναι να κάνουμε σύγκριση ανάμεσα στην πρόοδο που έχουμε σε κάθε βήμα ενός αλγορίθμου, με την πρόοδο που είχαμε στο προηγούμενο βήμα. Συγκεκριμένα, θεωρούμε ότι μία ακολουθία, έχει τάξη σύγκλισης r , με $r \geq 1$, στο x^* αν

$$a \leq \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^r} \leq b, \quad \text{με } 0 < a, b < 1.$$

Συγκεκριμένα, όταν $r = 1$ ο ρυθμός σύγκλισης λέγεται *γραμμικός* (linear convergence). Όταν $r = 2$, έχουμε σύγκλιση 2ης τάξης, η οποία ονομάζεται *τετραγωνική σύγκλιση* (square convergence). Επίσης, αν ισχύει ότι

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^r} = 0$$

τότε ο ρυθμός σύγκλισης ονομάζεται *υπεργραμμικός* (superlinear convergence).

2.3 Ιδιοτιμές και Ιδιοδιανύσματα

Σε αυτή την ενότητα, θα παρουσιάσουμε τις βασικές ιδιότητες των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων, τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια της διατριβής. Αλλά πρώτα να δώσουμε τον ορισμό της ορίζουσας και του χαρακτηριστικού πολυωνύμου ενός πίνακα A .

Ορισμός 2.13. (Ορίζουσα Πίνακα). Έστω ένας τετραγωνικός πίνακας A διάστασης $n \times n$ και έστω A_{ij} ο πίνακας, ο οποίος προκύπτει αν διαγράψουμε την i -στήλη και την j -γραμμή του πίνακα A . Η *ορίζουσα* (determinant) του πίνακα A , η οποία συμβολίζεται ως $\det(A)$ ή $|A|$ ορίζεται ως εξής

$$\det(A) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{ij})$$

Ένας τετραγωνικός πίνακας με μηδενική ορίζουσα ονομάζεται *ιδιάζων* (singular), ενώ αντίθετα ονομάζεται *μη ιδιάζων* (nonsingular). Επίσης, ο ιδιάζων πίνακας δεν αντιστρέφεται. Όπως θα δούμε στη συνέχεια η ορίζουσα ενός πίνακα είναι στενά συνδεδεμένη με τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα.

Ορισμός 2.14. (Χαρακτηριστικό Πολυώνυμο). Έστω ένας τετραγωνικός πίνακας A διάστασης $n \times n$, τότε το πολυώνυμο

$$\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I),$$

ονομάζεται *χαρακτηριστικό πολυώνυμο* (characteristic polynomial) του πίνακα A .

Επίσης, η εξίσωση $\chi_A(\lambda) = 0$, ονομάζεται *χαρακτηριστική εξίσωση* (characteristic equation) του πίνακα A . Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω ορισμούς μπορούμε να παρουσιάσουμε τους ορισμούς της ιδιοτιμής και του ιδιοδιανύσματος ενός πίνακα A .

Ορισμός 2.15. (Ιδιοτιμή-Ιδιοδιάνυσμα Πίνακα). Μία βαθμωτή ποσότητα λ ονομάζεται *ιδιοτιμή* (eigenvalue) ενός τετραγωνικού πίνακα A διάστασης $n \times n$, αν υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα $u \in \mathbb{R}^n$, τέτοιο ώστε

$$Au = \lambda u.$$

Επίσης, το διάνυσμα u ονομάζεται *ιδιοδιάνυσμα* (eigenvector) του πίνακα A , το οποίο αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ .

Ο αριθμός λ είναι μία ιδιοτιμή του πίνακα A , αν και μόνο αν $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$. Το γινόμενο των ιδιοτιμών είναι ίσο με την ορίζουσα του A , το οποίο συνεπάγεται ότι ένας μη ιδιάζων πίνακας έχει μη μηδενικές ιδιοτιμές. Επίσης, το σύνολο όλων των ιδιοτιμών του πίνακα A ονομάζεται *φάσμα* (spectrum) του A . Αν (λ, u) είναι ένα ιδιοζεύγος ενός μη ιδιάζων

πίνακα A , τότε το $(1/\lambda, u)$ είναι το αντίστοιχο ιδιοζεύγος του A^{-1} . Επιπλέον, αν (λ, u) είναι ένα ιδιοζεύγος του πίνακα A , τότε το $(\lambda + \mu, u)$ είναι ένα ιδιοζεύγος του πίνακα $A + \mu I$, όπου μ ένα βαθμωτό μέγεθος. Στη συνέχεια, συνοψίζουμε τις βασικές ιδιότητες που ισχύουν για τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα των συμμετρικών πινάκων, τις οποίες θα χρειαστούμε στη συνέχεια. Έστω A ένας συμμετρικός πίνακας, διάστασης $n \times n$. Τότε:

- Όλες οι ιδιοτιμές του είναι πραγματικές.
- Ο A είναι θετικά(αρνητικά) ορισμένος, αν και μόνο αν όλες οι ιδιοτιμές του είναι θετικές(αρνητικές).
- Ο A είναι θετικά(αρνητικά) ημιορισμένος, αν και μόνο αν όλες οι ιδιοτιμές του είναι μη αρνητικές(μη θετικές).
- Ο A είναι αόριστος, αν και μόνο αν έχει τόσο θετικές, όσο και αρνητικές ιδιοτιμές.

Επιπλέον, για ένα συμμετρικό πίνακα A , η φασματική του ανάλυση είναι

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i u_i^T,$$

όπου $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ είναι οι n πραγματικές ιδιοτιμές του και $u_1, u_2, \dots, u_n$ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα αυτών. Αυτή η ανάλυση μπορεί να επαναδιατυπωθεί ορίζοντας τους πίνακες U και Λ , όπου ο U είναι ο πίνακας των ιδιοδιανυσμάτων του A και $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, τότε

$$A = U \Lambda U^T.$$

Για θετικά ορισμένους συμμετρικούς πίνακες έχουμε ότι $\|A\|_2 = \lambda_n$, όπου λ_n είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του πίνακα A και $\|A^{-1}\|_2 = 1/\lambda_1$, όπου λ_1 η μικρότερη ιδιοτιμή του πίνακα A .

Έστω A ένας συμμετρικός πίνακας και $x \in \mathbb{R}^n$ μία καλή προσέγγιση ενός ιδιοδιανύσματος του A . Η ακόλουθη ποσότητα

$$R = \frac{x^T A x}{x^T x},$$

ονομάζεται *ποσότητα Rayleigh* (Rayleigh quotient) και είναι μία πολύ καλή προσέγγιση της ιδιοτιμής που αντιστοιχεί στο x .

2.3.1 Η Μέθοδος της Αντίστροφης Δύναμης

Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε μία οποιαδήποτε διακεκριμένη ιδιοτιμή λ_j ενός τετραγωνικού πίνακα A καθώς και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα u_j , δοθέντος ότι γνωρίζουμε μία καλή εκτίμηση λ της λ_j . Τότε μπορούμε να εφαρμόσουμε τη *μέθοδο της αντίστροφης δύναμης* (inverse power method) ή αλλιώς *μέθοδο της αντίστροφης επανάληψης* (inverse iteration method), η οποία προτάθηκε από τον Wielandt [130] και είναι μία γνωστή επαναληπτική μέθοδος για τον υπολογισμό ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων.

Δοθέντος ενός μη μηδενικού διανύσματος u_0 , η αντίστροφη επανάληψη δημιουργεί μία ακολουθία διανυσμάτων u_i , εφαρμόζοντας επαναληπτικά το σχήμα

$$u_i = (A - \hat{\lambda} I)^{-1} \frac{u_{i-1}}{\|u_{i-1}\|}, \quad i \geq 1,$$

όπου $\hat{\lambda} = \lambda + \epsilon$ με $\epsilon \rightarrow 0$ και λ είναι μία διακεκριμένη ιδιοτιμή του A ή μία καλή προσέγγισή της. Η ακολουθία των επαναλήψεων u_i συγκλίνει σε ένα ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην λ . Συνήθως, το αρχικό διάνυσμα u_0 επιλέγεται να είναι το κανονικοποιημένο διάνυσμα $(1, 1, \dots, 1)^T$. Επιπλέον, η λύση u_i κανονικοποιείται και αυτή. Αν λ είναι μία ακριβής ιδιοτιμή του πίνακα A και όχι μία προσέγγισή της, η μέθοδος συγκλίνει σε μία μόνο επανάληψη [68], παρέχοντας ένα κλειστό τύπο για το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Πράγματι η λύση $(A - \hat{\lambda}I)u_i = u_{i-1}/\|u_{i-1}\|$ είναι πολύ κοντά στη $(A - \hat{\lambda}I)u_i = 0$, λόγω του ότι ο πίνακας $A - \hat{\lambda}I$ είναι ιδιάζον. Επομένως, στη συγκεκριμένη περίπτωση, ο κλειστός τύπος υπολογισμού του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στη διακριτή ιδιοτιμή λ ενός πίνακα A διάστασης $n \times n$, είναι ο ακόλουθος

$$u = (A - \hat{\lambda}I)^{-1} \frac{1}{\sqrt{n}}(1, 1, \dots, 1)^T.$$

2.4 Παράγωγοι και Προσέγγιση κατά Taylor

Αυτή η ενότητα αναφέρεται στην θεμελιώδη ιδιότητα της διαφορισιμότητας συναρτήσεων, που τις περισσότερες φορές αποτελεί προϋπόθεση για την εφαρμογή των αλγορίθμων του μαθηματικού προγραμματισμού. Έστω $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μία μονοδιάστατη συνάρτηση. Η πρώτη παράγωγος ορίζεται ως

$$f'(x) = \frac{df}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Η συνάρτηση f ονομάζεται *παραγωγίσιμη* (differential function) στο x αν και μόνο αν υπάρχει το παραπάνω όριο. Έστω τώρα η n -διάστατη συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Η μερική παράγωγος της f ως προς x_i ορίζεται ως το όριο (αν υπάρχει)

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + he_i) - f(x)}{h}.$$

όπου e_i είναι το i μοναδιαίο διάνυσμα. Η συνάρτηση f ονομάζεται διαφορίσιμη αν όλες οι μερικές παράγωγοι υπάρχουν. Το διάνυσμα

$$\nabla f(x) = g(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

ονομάζεται *κλίση* (gradient). Αν η f είναι διαφορίσιμη στο x , τότε είναι και συνεχής σε αυτό. Αν οι παράγωγοι είναι και αυτές συνεχείς συναρτήσεις, τότε η f ονομάζεται *συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση*. Αν οι δεύτερες παράγωγοι της f ,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j}$$

υπάρχουν για όλα τα i, j , με $1 \leq i, j \leq n$ και είναι συνεχής συναρτήσεις του x , τότε η f ονομάζεται *δύο φορές συνεχής παραγωγίσιμη*. Αυτές οι n^2 παράγωγοι αναπαρίσταται από

έναν συμμετρικό πίνακα $n \times n$, ο οποίος ονομάζεται *Εσσιανός πίνακας* (Hessian matrix)

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

Οι συναρτήσεις που έχουν παραγώγους όλων των τάξεων ή μέχρι ενός συγκεκριμένου βαθμού σε κάποιο σύνολο που μας ενδιαφέρει, ονομάζονται *ομαλές* (smooth).

Θεώρημα 2.1. (Θεώρημα Μέσης Τιμής). Έστω μία συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, η οποία είναι συνεχώς διαφορίσιμη και έστω το διάνυσμα $d \in \mathbb{R}^n$, τότε

$$f(x + d) = f(x) + \nabla f(x + \alpha d)^T d,$$

για κάποιο $\alpha \in (0, 1)$. Επιπλέον, αν η f είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη, τότε έχουμε

$$\nabla f(x + d) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x + \alpha d)^T d d\alpha \quad (2.2)$$

και

$$f(x + d) = f(x) + d^T \nabla f(x) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x + \alpha d) d, \quad (2.3)$$

για κάποιο $\alpha \in (0, 1)$.

Το παραπάνω θεώρημα δείχνει ότι αν είναι γνωστές οι πρώτης και δεύτερης τάξης παράγωγοι μίας συνάρτησης σε ένα σημείο x , μπορούμε να φτιάξουμε προσεγγίσεις αυτής της συνάρτησης σε όλα τα σημεία μίας γειτονιάς του x . Συγκεκριμένα, μπορούμε να προσεγγίσουμε την $f(x + d)$ με την *κατά Taylor πρώτης τάξης προσέγγισή της* (first order Taylor expansion)

$$f(x + d) \approx f(x) + \nabla f(x)^T d, \quad (2.4)$$

ή με την *κατά Taylor δεύτερη τάξης προσέγγισή της* (second order Taylor expansion)

$$f(x + d) = f(x) + \nabla f(x)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x) d \quad (2.5)$$

Οι εξισώσεις (2.4) και (2.5) ονομάζονται *γραμμικό* και *τετραγωνικό μοντέλο* (linear - quadratic model) της f γύρω από ένα σημείο x , αντίστοιχα. Τα μοντέλα αυτά χρησιμοποιούνται ευρέως στους αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

2.4.1 Κατά Lipschitz Συνεχής Συνάρτηση

Ορισμός 2.16. (Κατά Lipschitz Συνεχής Συνάρτηση). Έστω $\mathcal{X}$ και $\mathcal{Y}$ ανοιχτά σύνολα και μία συνάρτηση $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$. Υποθέτουμε ότι οι $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ και $\|\cdot\|_{\mathcal{Y}}$ είναι οι μετρικές των δύο αυτών συνόλων, αντίστοιχα. Τότε λέμε ότι μία τέτοια συνάρτηση είναι *συνεχής κατά Lipschitz* στο $x \in \mathcal{X}$, αν υπάρχει $L(x)$ τέτοιο ώστε

$$\|f(\tilde{x}) - f(x)\|_{\mathcal{Y}} \leq L(x)\|\tilde{x} - x\|_{\mathcal{X}}, \quad \text{για κάθε } \tilde{x} \in \mathcal{X}.$$

Προφανώς, η σταθερά Lipschitz εξαρτάται τόσο από το x όσο και από τις μετρικές $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ και $\|\cdot\|_{\mathcal{Y}}$. Η συνάρτηση είναι τοπικά συνεχής κατά Lipschitz κοντά στο x , αν το σύνολο $\mathcal{X}$ είναι μία ανοιχτή σφαίρα με κέντρο το x . Είναι συνεχής κατά Lipschitz στο σύνολο $\mathcal{X}$ αν η σταθερά είναι ανεξάρτητη του x , δηλαδή αν υπάρχει L τέτοιο ώστε

$$\|f(\tilde{x}) - f(x)\|_{\mathcal{Y}} \leq L\|\tilde{x} - x\|_{\mathcal{X}}, \quad \text{για κάθε } x, \tilde{x} \in \mathcal{X}.$$

2.4.2 Κυρτότητα

Ορισμός 2.17. (Κυρτό Σύνολο). Ένα σύνολο $\mathcal{S}$ του $\mathbb{R}^n$ ονομάζεται *κυρτό* (convex set) αν για οποιαδήποτε σημεία $x, y \in \mathcal{S}$ και για κάθε $\lambda \in [0, 1]$, ισχύει ότι

$$\lambda x + (1 - \lambda)y \in \mathcal{S}.$$

Το σημείο $\lambda x + (1 - \lambda)y$ ονομάζεται *κυρτός συνδιασμός* (convex combination) των x και y .

Ορισμός 2.18. (Κυρτή/Κοίλη Συνάρτηση). Μία συνάρτηση f , ορισμένη σε ένα κυρτό σύνολο $\mathcal{S}$ είναι *κυρτή* (convex function), αν για όλα τα $x, y \in \mathcal{S}$ και για κάθε $\lambda \in [0, 1]$, έχουμε ότι

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y). \quad (2.6)$$

Επίσης, λέμε ότι μία συνάρτηση f είναι *κοίλη* (concave function), αν η $-f$ είναι κυρτή.

Αν η σχέση (2.6) ισχύει ως ανισότητα, δηλαδή

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y).$$

τότε η f ονομάζεται *ισχυρά κυρτή συνάρτηση* (strictly convex function). Αν μία συνάρτηση f είναι συνεχώς διαφορίσιμη, τότε ισχύει ότι

$$f(y) \geq f(x) + (y - x)^T \nabla f(x).$$

Επίσης, αν είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη, ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ημιορισμένος, για όλα τα $x \in \mathcal{S}$.

Ορισμός 2.19. (Καμπυλότητα Συνάρτησης). Ορίζουμε ως καμπυλότητα της f στο $x \in \mathcal{S}$ κατά μήκος μίας κατεύθυνσης d , το κλάσμα

$$\frac{d^T \nabla^2 f(x) d}{\|d\|^2}.$$

Αν η f είναι δύο φορές παραγωγίσιμη και ισχύει η ανισότητα,

$$d^T \nabla^2 f(x) d > 0,$$

τότε λέμε ότι η κατεύθυνση d είναι μία *κατεύθυνση θετικής καμπυλότητας* (positive curvature direction). Αντίστοιχα, αν ισχύει η ανισότητα

$$d^T \nabla^2 f(x) d < 0,$$

ότε λέμε ότι η κατεύθυνση d είναι μία *κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας* (negative curvature direction). Προφανώς, η καμπυλότητα μίας κυρτής συνάρτησης είναι πάντα μη αρνητικός αριθμός, ενώ ισχύει και το αντίθετο. Δηλαδή, αν ο Εσσιανός πίνακας μίας δύο φορές διαφορίσιμης συνάρτησης είναι θετικά ημιορισμένος σε όλο το $\mathcal{S}$, ή η καμπυλότητα της f σε κάθε σημείο $x \in \mathcal{S}$ κατά μήκος κάθε κατεύθυνσης d είναι μη αρνητική, τότε η f είναι κυρτή.

2.5 Στοιχεία Βελτιστότητας

Όπως αναφέραμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, στη παρούσα διατριβή ασχολούμαστε τη βελτιστοποίηση μη γραμμικών συναρτήσεων και με την εκπαίδευση τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Συγκεκριμένα, θέλουμε να υπολογίσουμε τοπικά ελάχιστα μίας αντικειμενικής συνάρτησης f , n πραγματικών μεταβλητών x , όπου το $x \in \mathbb{R}^n$, οπότε το πρόβλημα είναι χωρίς περιορισμούς. Πιο αναλυτικά, θεωρούμε το γενικό μαθηματικό πρόβλημα

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

όπου η f είναι μία ομαλή συνάρτηση από τον $\mathbb{R}^n$ στον $\mathbb{R}$.

Στη συνέχεια θα αναφέρουμε τις συνθήκες βελτιστότητας, οι οποίες είναι τα μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιούμε ώστε να επαληθεύσουμε αν ένα σημείο είναι ή όχι η βέλτιστη λύση του εκάστοτε προβλήματος βελτιστοποίησης που μελετάμε. Αυτές οι συνθήκες ελέγχουν αν ένα σημείο x^* έχει τη μικρότερη συναρτησιακή τιμή στη γειτονιά του. Επιπρόσθετα, η πληροφορία που δίνουν οι έλεγχοι βελτιστότητας χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του επόμενου δοκιμαστικού σημείου. Οι συνθήκες βελτιστότητας είναι η βάση της ανάπτυξης και της ανάλυσης των επαναληπτικών αλγορίθμων. Στην πράξη, οι αλγόριθμοι τερματίζουν όταν

αυτές οι συνθήκες ισχύουν προσεγγιστικά. Οι αποδείξεις των θεωρημάτων που αναφέρονται στη συνέχεια καθώς και περισσότερες λεπτομέρειες για τις συνθήκες βελτιστότητας, μπορούν να βρεθούν στις [31, 37, 102, 124]

2.5.1 Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς

Όπως αναφέραμε στο Κεφάλαιο 1, το πρόβλημα της βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς μπορεί να διατυπωθεί μαθηματικά ως εξής:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (2.7)$$

όπου η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι ομαλή.

Ορισμός 2.20. (Ασθενής/Ισχυρά Τοπικός Ελαχιστοποιητής). Ένα σημείο x^* ονομάζεται *ασθενής τοπικός ελαχιστοποιητής* αν υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε $f(x^*) \leq f(x)$ για όλα τα $x \in \mathbb{R}^n$, με $\|x - x^*\| < \delta$. Ένα σημείο x^* ονομάζεται *αυστηρά τοπικός ελαχιστοποιητής* αν υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε $f(x^*) < f(x)$ για όλα τα $x \in \mathbb{R}^n$, με $x \neq x^*$ και $\|x - x^*\| < \delta$.

Ορισμός 2.21. (Ισχυρά Ολικός Ελαχιστοποιητής). Ένα σημείο x^* ονομάζεται *ολικός ελαχιστοποιητής* της f αν $f(x^*) \leq f(x)$, για όλα τα $x \in \mathbb{R}^n$. Ένα σημείο x^* ονομάζεται *αυστηρά ολικός ελαχιστοποιητής* της f αν $f(x^*) < f(x)$, για όλα τα $x \in \mathbb{R}^n$.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι τύποι των ελαχιστοποιητών που παρουσιάσαμε.

Εικόνα 2.1: Παραδείγματα τοπικού και ολικού ελαχιστοποιητή σε μία διάσταση

Όταν η αντικειμενική συνάρτηση είναι κυρτή, όλοι οι τοπικοί ελαχιστοποιητές είναι και ολικοί. Ονομάζουμε ελάχιστο την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f στον ελαχιστοποιητή. Οι συνθήκες βελτιστότητας για το πρόβλημα (2.7) συνάγονται υποθέτοντας πρώτον, ότι ένα σημείο x^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής της συνάρτησης f και δεύτερον, θεσπίζοντας κάποιες ιδιότητες που πρέπει να πληροί το συγκεκριμένο σημείο, αναφορικά με της πρώτης και δεύτερης τάξης παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης f στο σημείο αυτό.

Ορισμός 2.22. (Κατεύθυνση Μείωσης). Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ διαφορίσιμη στο $x \in \mathbb{R}^n$. Αν υπάρχει διάνυσμα $d \in \mathbb{R}^n$ τέτοιο ώστε

$$d^T \nabla f(x) < 0, \quad (2.8)$$

τότε η d ονομάζεται κατεύθυνση μείωσης της f στο x .

Θεώρημα 2.2. (Πρώτης Τάξης Αναγκαία Συνθήκη). Έστω $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο $\mathcal{D}$. Αν το $x^* \in \mathcal{D}$ είναι τοπικός ελαχιστοποιητής του προβλήματος (2.7), τότε

$$\nabla f(x^*) = 0. \quad (2.9)$$

Η παραπάνω απαίτηση (2.9) είναι γνωστή ως *πρώτης τάξης (αναγκαία) συνθήκη*.

Ένα σημείο x^* που ικανοποιεί τη σχέση (2.9) αναφέρεται ως *πρώτης τάξης κρίσιμο σημείο* ή *πρώτης τάξης στάσιμο σημείο* της f . Κάθε τοπικός ελαχιστοποιητής πρέπει να είναι πρώτης τάξης κρίσιμο σημείο.

Ορισμός 2.23. (Κρίσιμο/Στάσιμο Σημείο). Ένα σημείο $x^* \in \mathbb{R}^n$ ονομάζεται *στάσιμο σημείο* (stationary point) ή *κρίσιμο σημείο* (crucial point) της διαφορίσιμης συνάρτησης f , αν

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

Θεώρημα 2.3. (Δεύτερης Τάξης Αναγκαία Συνθήκη). Έστω $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο $\mathcal{D}$. Αν το x^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής του προβλήματος (2.7), τότε ισχύει η σχέση (2.9) και ο Εσσιανός πίνακας της f στο x^* είναι θετικά ημιορισμένος. Δηλαδή,

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{και} \quad s^T \nabla^2 f(x^*) s \geq 0 \quad \text{για όλα τα } s \in \mathbb{R}^n. \quad (2.10)$$

Η παραπάνω απαίτηση (2.10) είναι γνωστή ως *δεύτερης τάξης (αναγκαία) συνθήκη*.

Επίσης, αξίζει να τονίσουμε ότι το x^* που τις ικανοποιεί ονομάζεται *δεύτερης τάξης κρίσιμο σημείο* της f . Προφανώς, ο Εσσιανός της f είναι οπωσδήποτε θετικά ημιορισμένος στον ελαχιστοποιητή. Το ακόλουθο θεώρημα αναφέρει υπό ποιες συνθήκες ένα σημείο x^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής της αντικειμενικής συνάρτησης f .

Θεώρημα 2.4. (Δεύτερης Τάξης Ικανή Συνθήκη). Έστω $f : \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο $\mathcal{D}$. Αν

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{και} \quad s^T \nabla^2 f(x^*) s > 0 \quad \text{για όλα τα } s \in \mathbb{R}^n, \quad \text{με } s \neq 0.$$

τότε το x^* ονομάζεται *αυστηρός ελαχιστοποιητής* του προβλήματος (2.7).

Το Θεώρημα 2.4 δηλώνει ότι αν το x^* είναι τοπικός ελαχιστοποιητής, τότε είναι πρώτης τάξης κρίσιμο σημείο. Εντούτοις, το αντίστροφο δεν ισχύει. Αν το x^* είναι πρώτης τάξης κρίσιμο σημείο, μπορεί να είναι είτε τοπικός ελαχιστοποιητής ή τοπικός μεγιστοποιητής, αλλά μπορεί να μην είναι τίποτα από τα δύο. Στην τελευταία περίπτωση, το x^* ονομάζεται *σαγματικό σημείο* (saddle point). Συνεπώς, ένα πρώτης τάξης κρίσιμο σημείο δεν είναι κατ' ανάγκη τοπικός ελαχιστοποιητής. Όμως, αν η αντικειμενική συνάρτηση, η οποία είναι διαφορίσιμη, είναι κυρτή, τότε τα κρίσιμα σημεία είναι τοπικοί και ολικό ελαχιστοποιητές του προβλήματος (2.7).

Θεώρημα 2.5. Έστω $\mathcal{S} \in \mathbb{R}^n$ ένα μη κενό κυρτό σύνολο και $f : \mathcal{S} \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Έστω $x^* \in \mathcal{S}$ τοπικός ελαχιστοποιητής του προβλήματος

$$\min_{x \in \mathcal{S}} f(x)$$

1. Αν η f είναι κυρτή, τότε το x^* είναι και ολικός ελαχιστοποιητής.
2. Αν η f είναι αυστηρά κυρτή, τότε το x^* είναι μοναδικός ολικός ελαχιστοποιητής.

Το επόμενο θεώρημα παρουσιάζει ότι για διαφορίσιμη κυρτή συνάρτηση, το κρίσιμο σημείο είναι ολικός ελαχιστοποιητής. Οπότε, οι ακόλουθες συνθήκες βελτιστότητας είναι ικανές και αναγκαίες

Θεώρημα 2.6. Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ συνεχώς διαφορίσιμη και κυρτή. Τότε το x^* είναι ολικός ελαχιστοποιητής του προβλήματος (2.7) αν και μόνο αν

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

Μέρος II

Μαθηματικές Μέθοδοι Μη Γραμμικής Βελτιστοποίησης

Μη Γραμμικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης χωρίς Περιορισμούς

Οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς απαιτούν ένα αρχικό σημείο x_0 , για την έναρξη της έρευνας. Η επιλογή του σημείου μπορεί να είναι τυχαία ή μπορούμε να αντλήσουμε γνώση από τη φυσιολογία του προβλήματος και από τα δεδομένα του έτσι ώστε να καταλήξουμε στην επιλογή μίας πιο επιτυχημένης προσέγγισης.

Ξεκινώντας από το x_0 , οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης δημιουργούν μία ακολουθία σημείων $\{x_k\}$ που τερματίζει είτε όταν υπολογιστεί μία λύση με μία δεδομένη ακρίβεια είτε αν δεν μπορεί να βρει καμία λύση. Για την εύρεση του επόμενου σημείου x_{k+1} από την επανάληψη x_k , οι αλγόριθμοι χρησιμοποιούν πληροφορίες από τη συναρτησιακή τιμή της f στο x_k και πιθανότατα πληροφορίες από προηγούμενες επαναλήψεις $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}$. Όλες αυτές οι πληροφορίες χρησιμοποιούνται για την εύρεση του επόμενου σημείου x_{k+1} , το οποίο έχει μικρότερη συναρτησιακή τιμή από το x_k . Υπάρχουν τρεις θεμελιώδεις στρατηγικές για να κινηθούμε από το σημείο x_k στο επόμενο x_{k+1} , η στρατηγική της γραμμικής αναζήτησης, η στρατηγική της καμπυλόγραμμης αναζήτησης και η στρατηγική της περιοχής εμπιστοσύνης, τις οποίες αναλύουμε συνοπτικά στη συνέχεια.

3.1 Βασικές Στρατηγικές Βελτιστοποίησης

Οι πιο διαδεδομένες μέθοδοι βελτιστοποίησης βασίζονται στη στρατηγική της *γραμμικής αναζήτησης* (line search), οι οποίες υπολογίζουν μία κατεύθυνση μείωσης και στη συνέχεια ψάχνουν κατά μήκος αυτής της κατεύθυνσης από το δεδομένο σημείο x_k , το επόμενο x_{k+1} .

Εκτός από τις μεθόδους γραμμικής αναζήτησης, οι οποίες συνήθως χρησιμοποιούν πρώτης τάξης πληροφορία, οι *μέθοδοι καμπυλόγραμμης αναζήτησης* (curvilinear search) χρησιμοποιούν πληροφορία δεύτερης τάξης, η οποία εισάγεται μέσω της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας και αναζητούν μία καινούργια επανάληψη μέσω της καμπύλης συνδυάζοντας δύο κατευθύνσεις μείωσης.

Οι μέθοδοι, οι οποίες βασίζονται στη στρατηγική της *περιοχής εμπιστοσύνης* (trust region), διοχετεύουν τις πληροφορίες που έχουν συλλέξει από την αντικειμενική συνάρτηση f για τη δημιουργία μίας *συνάρτησης μοντέλο* m_k , της οποίας η συμπεριφορά κοντά στο σημείο x_k είναι παρόμοια με τη συμπεριφορά αντικείμενης συνάρτησης f . Επειδή η συνάρτηση μοντέλο m_k μπορεί να μην είναι μία καλή προσέγγιση της f όταν το x^* είναι μακριά από το x_k , περιορίζουμε την έρευνα για το ελάχιστο της m_k σε μία γειτονιά γύρω από το x_k .

Με άλλα λόγια, υπολογίζουμε το υποψήφιο βήμα d προσεγγίζοντας τη λύση του παρακάτω υποπροβλήματος: $\min_d x_k + d$, όπου το $x_k + d$ βρίσκεται μέσα στην περιοχή εμπιστοσύνης.

Σε αυτή τη διδακτορική διατριβή θα ασχοληθούμε με τις μεθόδους, οι οποίες βασίζονται στη στρατηγική της γραμμικής ή της καμπυλόγραμμης αναζήτησης.

3.2 Γραμμική Αναζήτηση

Οι μέθοδοι γραμμικής αναζήτησης αναφέρονται στη βελτιστοποίηση μίας μονοδιάστατης συνάρτησης και αποτελούν τη βάση της βελτιστοποίησης συναρτήσεων πολλών μεταβλητών. Δοθέντος ενός σημείου x_k , οι μέθοδοι γραμμικής αναζήτησης δημιουργούν μία ακολουθία $\{x_k\}$ μέσω του επαναληπτικού σχήματος

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.1)$$

όπου α_k είναι το μήκος βήματος και d_k είναι η κατεύθυνση μείωσης. Προφανώς, η επιτυχία των μεθόδων γραμμικής αναζήτησης εξαρτάται από την επιλογή της κατεύθυνσης μείωσης d_k και του μήκους βήματος α_k σε κάθε επανάληψη. Ο βασικός σκοπός μας είναι δοθείσης μίας κατεύθυνσης μείωσης d_k , να βρούμε ένα κατάλληλο μήκος βήματος α_k , έτσι ώστε στη νέα επανάληψη η αντικειμενική συνάρτηση να έχει μικρότερη τιμή από ότι στην προηγούμενη επανάληψη. Αν θέσουμε

$$\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k),$$

το πρόβλημα της αναζήτησης ενός μήκους βήματος στην κατεύθυνση d_k τέτοιου ώστε

$$\phi(\alpha_k) < \phi(0),$$

είναι απλά μία γραμμική αναζήτηση για το α . Για τον υπολογισμό του μήκους βήματος α_k έχουμε να αντιμετωπίσουμε ένα μεγάλο πρόβλημα. Συγκεκριμένα, θέλουμε να επιλέξουμε το κατάλληλο βήμα α_k χωρίς μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Θεωρητικά, η επιλογή που θα έδινε το βέλτιστο α_k αποτελεί τη λύση του ακόλουθου μονοδιάστατου προβλήματος ελαχιστοποίησης

$$\min_{\alpha > 0} \phi(\alpha), \quad \text{όπου} \quad \phi(\alpha) = f(x_k + \alpha d_k) \quad (3.2)$$

Εντούτοις, ο ακριβής ελαχιστοποιητής του προβλήματος (3.2) είναι υπολογιστικά ακριβός και μη απαραίτητος. Επομένως, αντί να λυθεί το πρόβλημα (3.2) επακριβώς και να εκτελεστεί μία *ακριβής γραμμική αναζήτηση* (exact line search), συνήθως προτιμάται η επίλυση του προβλήματος (3.2) προσεγγιστικά, εκτελώντας μία *μη-ακριβή γραμμική αναζήτηση* (inexact line search), στην οποία επιβάλλονται κάποιες συνθήκες, ώστε να εξασφαλιστεί μία επαρκής μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης f . Οι συνθήκες αυτές χρησιμοποιούν πληροφορία πρώτης τάξης, ενώ οι πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες είναι η συνθήκη Armijo [11], οι συνθήκες Wolfe [131, 132] και οι ισχυρές συνθήκες Wolfe [131, 132].

Οι τυπικοί αλγόριθμοι γραμμικής αναζήτησης επιλέγουν το μήκος βήματος από μία ακολουθία υποψήφιων τιμών για το α_k . Ξεκινούν τη σάρωση των τιμών και σταματούν στη πρώτη τιμή που ικανοποιεί κάποιες συνθήκες. Συγκεκριμένα, η σάρωση και η επιλογή της τιμής γίνεται σε δυο φάσεις:

- Η *φάση εγκλεισμού* (bracketing phase) ενός διαστήματος που περιέχει τις υποψήφιες τιμές του μήκους βήματος α_k .

- Η *φάση διχοτόμησης ή παρεμβολής* (bisection or interpolation phase) στη οποία υπολογίζεται ένα μήκος βήματος από τις υποψήφίες τιμές για τη δεδομένη επανάληψη.

3.2.1 Συνθήκη Armijo

Μία δημοφιλής συνθήκη για τις μη ακριβείς μεθόδους γραμμικής αναζήτησης που εγγυάται ότι το μήκος βήματος α_k πρέπει πρώτα απ' όλα να μειώνει την νέα συναρτησιακή τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f είναι η συνθήκη Armijo [11].

Ορισμός 3.1. (Συνθήκη Armijo).

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \delta \alpha_k g_k^T d_k, \quad (3.3)$$

όπου $\alpha_k = \max\{\lambda^j, j = 0, 1, 2, \dots\}$ με $\delta, \lambda \in (0, 1)$.

3.2.2 Συνθήκες Wolfe

Η συνθήκη Armijo όμως, δεν είναι αρκετή, ώστε να μας εξασφαλίσει ότι ο αλγόριθμος έχει λογική πρόοδο επειδή ικανοποιείται για σχεδόν όλες τις μικρές τιμές του α . Για τον περιορισμό των πολύ μικρών βημάτων, θα πρέπει η γραμμική αναζήτηση να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe [131, 132].

Ορισμός 3.2. (Συνθήκες Wolfe).

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (3.4)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k, \quad (3.5)$$

με $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$.

Η γεωμετρική αναπαράσταση της δεύτερης συνθήκης Wolfe (3.5), γνωστής ως *συνθήκη καμπυλότητας*, είναι ότι η κλίση $\phi(\alpha_k)$ στο αποδεκτό σημείο πρέπει να είναι μεγαλύτερη ή ίση από ένα πολλαπλάσιο σ_2 της αρχικής κλίσης. Επίσης, αξίζει να τονίσουμε ότι η συνθήκη (3.5) αποτελεί μία προσέγγιση της συνθήκης ορθογωνιότητας

$$g_{k+1}^T d_k > 0,$$

η οποία ικανοποιείται αν εκτελείται ακριβής γραμμική αναζήτηση.

3.2.3 Ισχυρές Συνθήκες Wolfe

Όμως ένα προφανές μειονέκτημα της συνθήκης (3.5) είναι η ότι η γραμμική αναζήτηση δεν ανάγεται σε ακριβή στην περίπτωση όπου $\sigma_2 \rightarrow 0$. Επιπλέον, ένα μήκος βήματος, το οποίο ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe δεν είναι απαραίτητα κοντά στο ελάχιστο της ϕ .

Για την αντιμετώπιση των παραπάνω προβλημάτων προτάθηκαν οι ισχυρές συνθήκες Wolfe [131, 132].

Ορισμός 3.3. (Ισχυρές Συνθήκες Wolfe).

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (3.6)$$

$$|g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \sigma_2 |g_k^T d_k|, \quad (3.7)$$

με $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$.

Η μοναδική διαφορά της με τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) είναι ότι δεν επιτρέπουμε πλέον στην παράγωγο $\phi'(\alpha_k)$ να είναι αρκετά θετική, έτσι ώστε να αποφεύγουμε μήκη βήματος, τα οποία είναι μακριά από τα κρίσιμα σημεία της ϕ .

3.2.4 Αλγόριθμος Γραμμικής Αναζήτησης

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε έναν τυπικό αλγόριθμο γραμμικής αναζήτησης.

Αλγόριθμος 3.1 Αλγόριθμος Γραμμικής Αναζήτησης

Βήμα 1: Δοθέντος x_0 και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε τερμάτισε.

Βήμα 3: Υπολόγισε την κατεύθυνση μείωσης d_k , έτσι ώστε $d_k^T g_k < 0$.

Βήμα 4: Υπολόγισε το μήκος βήματος έτσι ώστε να ικανοποιούνται η συνθήκη Armijo (3.3) ή οι συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) ή οι ισχυρές συνθήκες Wolfe (3.6) και (3.7).

Βήμα 5: Θέσε $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Βήμα 6: Θέσε $k = k + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 2.

Υπόθεση 3.1. Το σύνολο $\mathcal{L} = \{x \in \mathbb{R}^n | f(x) \leq f(x_0)\}$ είναι φραγμένο, δηλαδή υπάρχει μία θετική σταθερά $B > 0$, τέτοια ώστε

$$\|x\| \leq B, \quad \forall x \in \mathcal{L} \quad (3.8)$$

Υπόθεση 3.2. Σε κάποια γειτονιά $\mathcal{N} \in \mathcal{L}$, η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι διαφορίσιμη και η κλίση ∇f είναι συνεχής κατά Lipschitz, δηλαδή υπάρχει μία θετική σταθερά $L > 0$, τέτοια ώστε

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathcal{N}.$$

Εφόσον η ακολουθία $\{f(x_k)\}$ είναι μία φθίνουσα ακολουθία, είναι προφανές ότι η ακολουθία $\{x_k\}$ περιέχεται στο σύνολο $\mathcal{L}$. Επιπλέον, από τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2 αποκομίζουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $M > 0$ τέτοια ώστε

$$\|\nabla f(x)\| \leq M, \quad \forall x \in \mathcal{L}. \quad (3.9)$$

Το παρακάτω λήμμα είναι ένα γενικό αποτέλεσμα των μεθόδων γραμμικής αναζήτησης, οι οποίες έχουν υλοποιηθεί με τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) ή με τις ισχυρές συνθήκες Wolfe (3.6) και (3.7) έχει την παρακάτω ιδιότητα. Στη διεθνή βιβλιογραφία ονομάζεται συνθήκη Zoytendijk.

Λήμμα 3.1. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Θεωρούμε μία επαναληπτική μέθοδο της μορφής (3.1), όπου η d_k είναι μία κατεύθυνση μείωσης, δηλαδή $g_k^T d_k < 0$ και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) ή τις ισχυρές συνθήκες Wolfe (3.6) και (3.7), τότε

$$\sum_{k \geq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < +\infty.$$

3.3 Καμπυλόγραμμα Αναζήτηση

Για την επίλυση αυτού του προβλήματος, πέρα από τις μεθόδους γραμμικής αναζήτησης, οι οποίες χρησιμοποιούν πρώτης τάξης πληροφορία, χρησιμοποιούνται και οι *μέθοδοι καμπυλόγραμμης αναζήτησης*, οι οποίες χρησιμοποιούν πληροφορία δεύτερης τάξης, η οποία εισάγεται μέσω της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας (negative curvature direction).

Ορισμός 3.4. (Κατεύθυνση Αρνητικής Καμπυλότητας). Έστω μία συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, η οποία είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη τότε το διάνυσμα $d \in \mathbb{R}^n$ είναι μία *κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας* σε ένα σημείο $x \in \mathbb{R}^n$, αν ισχύει η σχέση

$$d^T \nabla^2 f(x) d < 0,$$

στο σημείο x .

Αυτή η κατεύθυνση συνδέεται με το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του Εσσιανού πίνακα της f . Στην κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας, το τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης

$$m_k(x_k + d) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x_k) d,$$

δεν είναι κάτω φραγμένο, με αποτέλεσμα να υπάρχει δυνατότητα μεγάλης μείωσης της τιμής της f , προς την κατεύθυνση αυτή.

Ιστορικά, η χρήση της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας προτάθηκε αρχικά από τους Fiacco και McCormick [43] και από τους Botsaris και Jacobson [24]. Αργότερα, ο McCormick [90] τροποποίησε την συνθήκη Armijo (3.3) έτσι ώστε η μέθοδος να μπορεί να χρησιμοποιεί πληροφορία δεύτερης τάξης, ειδικά στη περίπτωση όπου ο Εσσιανός πίνακας δεν είναι θετικά ημιορισμένος. Βασισμένοι στις προηγούμενες εργασίες, οι Moré και Sorensen [95] και ο Goldfarb [51] πρότειναν μία παρόμοια προσέγγιση, στην οποία η αναζήτηση μίας καινούργιας επανάληψης γινόταν μέσω της καμπύλης

$$C = \{x(\alpha) : x(\alpha) = x + \phi_1(\alpha)p + \phi_2(\alpha)d, \alpha \geq 0\},$$

με $\phi_1(0) = \phi_2(0) = 0$, συνδυάζοντας δύο κατευθύνσεις: την κατεύθυνση p , που είναι μία κατεύθυνση τύπου Newton και την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d . Επιπλέον, στην εργασία των Moré και Sorensen [95], χρησιμοποιήθηκε ένας κανόνας τύπου Armijo, έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η σύγκλιση της μεθόδου σε δεύτερης τάξης κρίσιμα σημεία, όπου ο Εσσιανός είναι θετικά ημιορισμένος. Πρόσφατα, στην εργασία των Gould et al. [55], προτάθηκε ένας εναλλακτικός τρόπος χρήσης της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας. Η κατεύθυνση αυτή χρησιμοποιήθηκε μαζί με την κατεύθυνση τύπου Newton σε μία κατάλληλα διαμορφωμένη γραμμική αναζήτηση. Τέλος, οι Olivares et al. [103] απέδειξαν κάποιες συνθήκες, οι οποίες παρέχουν τη δυνατότητα σε κάθε επανάληψη, να μπορεί να επιλεγεί είτε μία γραμμική αναζήτηση (η οποία χρησιμοποιεί μία μόνο από τις δύο κατευθύνσεις) είτε μία καμπυλόγραμμη αναζήτηση, στην οποία συνδυάζονται και οι δύο κατευθύνσεις. Ο υπολογισμός της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας είναι ισοδύναμος με τον υπολογισμό του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του Εσσιανού πίνακα [21–23]. Οι Moré και Sorensen [95] χρησιμοποίησαν την παραγοντοποίηση των Bunch και Parlett [25], ενώ οι Ferris et al. [42] ενσωμάτωσαν αυτή την προσέγγιση με ένα μη μονότονο πλαίσιο αναζήτησης. Και στις δύο περιπτώσεις, ο υπολογισμός της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας απαιτεί την παραγοντοποίηση πινάκων καθώς και στην αποθήκευσή τους, κάτι το οποίο είναι απαγορευτικό, όταν η διάσταση του προβλήματος είναι πολύ μεγάλη. Στην εργασία των Lucidi et al. [85], ο υπολογισμός της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας βασίστηκε στη μέθοδο Lanczos [52]. Όμως, επειδή η μέθοδος απαιτεί την αποθήκευση πίνακα, μόνο λίγα διανύσματα της διαδικασίας Lanczos αποθηκεύονται και όχι όλα όσα θα έπρεπε. Άλλες εργασίες, οι οποίες χρησιμοποιούν την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας, την υπολογίζουν μέσω της μεθόδου Lanczos, σε συνδυασμό με τη μέθοδο των μη γραμμικών συζυγών κλίσεων [55, 86]. Σε αυτές τις μεθόδους, είναι απαραίτητο να επαναλαμβάνεται η αναδρομική διαδικασία, έτσι ώστε να ξαναδημιουργούνται τα Lanczos διανύσματα, όπου αυτό είναι απαραίτητο. Πρόσφατα, οι Fasano και Roma [40] πρότειναν τη χρήση αλγορίθμων συζυγών κλίσεων για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας.

3.3.1 Συνθήκες Βήματος Δεύτερης Τάξης

Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε αναλυτικά τις συνθήκες βήματος δεύτερης τάξης, πάνω στις οποίες βασίζονται οι μέθοδοι καμπυλόγραμμης αναζήτησης. Οι συνθήκες αυτές χρησιμοποιούν την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας.

Υπόθεση 3.3. Εστω η συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, η οποία είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο $\mathcal{D}$ και υποθέτουμε ότι για κάποιο $x_0 \in \mathcal{D}$, το σύνολο

$$\Omega = \{x \in \mathcal{D} : f(x) \leq f(x_0)\}$$

είναι συμπαγές.

Υπό την Υπόθεση 3.3, μπορούμε να κατασκευάσουμε ένα τοπικό τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης f , από το αντίστοιχο ανάπτυγμα της σειράς Taylor, για όλες τις επαναλήψεις $x_k \in \Omega$, ως ακολούθως:

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

όπου B_k είναι ένας θετικά ορισμένος συμμετρικός πίνακας. Με αυτό τον τρόπο, η Quasi-Newton κατεύθυνση p_k μπορεί να υπολογιστεί από τον τύπο

$$p_k = \begin{cases} -B_k^{-1} g_k, & \text{αν } B_k > 0; \\ -g_k, & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Η κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_k , σχετίζεται με το ιδιοδιάνυσμα u_k που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του πίνακα B_k και υπολογίζεται από τον τύπο

$$d_k = \begin{cases} 0, & \text{αν } B_k > 0; \\ -\text{sgn}(u_k^T g_k) u_k, & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Και οι δύο κατευθύνσεις p_k και d_k θα πρέπει να είναι κατευθύνσεις μείωσης.

Ορισμός 3.5. (Ζεύγος Κατευθύνσεων Μείωσης). Ένα ζεύγος κατευθύνσεων (p, d) ονομάζεται ζεύγος μείωσης σε ένα σημείο x στο οποίο η αντικειμενική συνάρτηση f είναι δυο φορές συνεχώς διαφορίσιμη, αν ισχύουν οι σχέσεις

$$p^T \nabla f(x) < 0, \quad d^T \nabla f(x) \leq 0, \quad \text{και} \quad d^T \nabla^2 f(x) d = 0,$$

αν $\nabla^2 f(x) \geq 0$ και

$$p^T \nabla f(x) \leq 0, \quad d^T \nabla f(x) \leq 0, \quad \text{και} \quad d^T \nabla^2 f(x) d < 0,$$

διαφορετικά.

Από μία πιο πρακτική σκοπιά, σε μία δοσμένη επανάληψη x_k , το ζεύγος (p_k, d_k) υποτίθεται ότι είναι ικανό ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης, αν οι ακολουθίες $\{p_k\}$ και $\{d_k\}$ είναι φραγμένες και ικανοποιούν τις παρακάτω συνθήκες [51]:

Συνθήκη 3.1. $g_k^T p_k = 0$ συνεπάγεται ότι $g_k = 0$ και $p_k = 0$.

Συνθήκη 3.2. $g_k^T p_k \rightarrow 0$ συνεπάγεται ότι $g_k \rightarrow 0$ και $p_k \rightarrow 0$.

Συνθήκη 3.3. $d_k^T B_k d_k \rightarrow 0$ συνεπάγεται ότι $\min(\lambda_1, 0) \rightarrow 0$ και $d_k \rightarrow 0$, όπου λ_1 είναι η μικρότερη ιδιοτιμή του πίνακα B_k .

Οι Συνθήκες 3.1 και 3.2 είναι οι βασικές που πρέπει να ισχύουν για τις κατευθύνσεις τύπου Newton, οι οποίες πρέπει να είναι κατευθύνσεις μείωσης. Εξασφαλίζουν ότι οι $p_k \neq 0$ και $g_k \neq 0$ δεν είναι ορθογώνιες και δεν γίνονται τέτοιες γρήγορα. Η Συνθήκη 3.3 εξασφαλίζει ότι η d_k περιέχει πληροφορία, η οποία σχετίζεται με τη μικρότερη ιδιοτιμή του Εσσιανού ή του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα.

3.3.2 Η Μέθοδος των Moré και Sorensen

Οι Moré και Sorensen [95] πρότειναν τη χρήση της κατεύθυνσης αρνητικής καμπυλότητας για τη δημιουργία μίας ακολουθίας $\{x_k\}$ μέσω του επαναληπτικού σχήματος

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k^2 p_k + \alpha_k d_k, \quad (3.10)$$

όπου (p_k, d_k) είναι ένα ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης στο x_k . Αντικαθιστώντας την (3.10) στις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5), απαιτούμε από το μήκος βήματος να ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες, οι οποίες ονομάζονται συνθήκες Wolfe δεύτερης τάξης.

Ορισμός 3.6. (Συνθήκες Wolfe 2ης Τάξης).

$$f(x_k + \alpha_k^2 p_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq c_1 \alpha_k^2 \left[g_k^T p_k + \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k \right], \quad (3.11)$$

$$g(x_k + \alpha_k^2 p_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq c_2 \left[g_k^T d_k + 2\alpha_k g_k^T p_k + \alpha_k d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k \right], \quad (3.12)$$

με $0 < c_1 < c_2 < 1$.

Στην περίπτωση όπου $d_k = 0$ τότε οι συνθήκες (3.11) και (3.12) ανάγονται στις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5), αντίστοιχα. Επίσης, αν (p_k, d_k) είναι ένα ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης στο σημείο x_k και θέσουμε

$$\Phi_k(\alpha_k) = f(x_k + \alpha_k^2 p_k + \alpha_k d_k),$$

τότε οι συνθήκες (3.11) και (3.12) είναι ισοδύναμες με τις συνθήκες

$$\begin{aligned} \Phi_k(\alpha_k) &\leq \Phi_k(0) + \frac{1}{2} c_1 \Phi_k''(0) \alpha_k^2 \\ \Phi_k'(\alpha_k) &\geq c_2 \left(\Phi_k'(0) + \Phi_k''(0) \alpha_k \right). \end{aligned}$$

Θεώρημα 3.1. [95]. Έστω ότι η συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ικανοποιεί την Υπόθεση 3.3. Αν η ακολουθία $\{x_k\}$ ικανοποιεί τις δεύτερης τάξης συνθήκες Wolfe (3.11) και (3.12), τότε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k^T p_k = 0 \quad \text{και} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} d_k^T B_k d_k = 0.$$

3.4 Μέθοδος της Απότομης Μείωσης

Η μέθοδος της απότομης μείωσης είναι πιθανότατα η πιο απλή και η πιο θεμελιώδης μέθοδος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Το όνομα της προέρχεται από το γεγονός ότι χρησιμοποιεί την *κατεύθυνση της απότομης μείωσης* (steepest descent direction) [26, 87], η οποία αποτελεί την πιο προφανή επιλογή της κατεύθυνσης για μία μέθοδο γραμμικής αναζήτησης.

Διαισθητικά, από όλες τις κατευθύνσεις που μπορούμε να επιλέξουμε σ'ένα σημείο x_k , η κατεύθυνση της απότομης μείωσης είναι αυτή η οποία ελαχιστοποιεί πιο γρήγορα την αντικειμενική συνάρτηση f . Για να αποδείξουμε τον παραπάνω ισχυρισμό χρησιμοποιούμε την προσέγγιση κατά Taylor πρώτης τάξης (2.4), δηλαδή

$$f(x_k + \alpha d_k) \approx f(x_k) + \alpha d_k^T g_k = m_k(d_k).$$

Η βασική ιδέα της μεθόδου της απότομης μείωσης έχει ως εξής: αντί να ελαχιστοποιήσουμε την f , ελαχιστοποιούμε το γραμμικό μοντέλο της $m_k(d_k)$, το οποίο κατασκευάζεται στην τρέχουσα επανάληψη x_k . Ο ρυθμός μεταβολής της τιμής του μοντέλου της f κατά μήκος της κατεύθυνσης d_k στο x_k είναι ο συντελεστής του α , δηλαδή η ποσότητα $d_k^T g_k$. Αυτό συνεπάγεται ότι όσο μικρότερη είναι η τιμή της ποσότητας $d_k^T g_k$ τόσο μικρότερη θα είναι και η συναρτησιακή τιμή της συνάρτησης f . Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz έχουμε ότι

$$|d_k^T g_k| \leq \|d_k\| \|g_k\|,$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η ποσότητα $d_k^T g_k$ ελαχιστοποιείται αν $d_k = -g_k$, οπότε η κατεύθυνση της απότομης μείωσης d_k^{SD} δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$d_k^{\text{SD}} = -g_k. \quad (3.13)$$

Τα πλεονεκτήματα της μεθόδου είναι ότι χρειάζεται μόνο τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης f και όχι και του Εσσιανού πίνακα και είναι πολύ απλή στην υλοποίησή της. Παρόλα αυτά, το βασικό της μειονέκτημα είναι ότι μπορεί να είναι εξαιρετικά αργή σε δύσκολα προβλήματα βελτιστοποίησης [102, 124]. Επίσης, η κατεύθυνση της απότομης μείωσης (3.13) χρησιμοποιείται ευρέως για να εγγυηθεί την σύγκλιση μεθόδων γραμμικής και καμπυλόγραμμης αναζήτησης.

3.5 Μέθοδος Newton

Άλλη μία κατεύθυνση, η οποία πιθανότητα αποτελεί τη θεωρητικά καλύτερη απ' όλες [102], είναι η *κατεύθυνση Newton* (Newton direction). Η κατεύθυνση αυτή πηγάζει από την προσέγγιση κατά Taylor δεύτερης τάξης (2.5), δηλαδή

$$f(x_k + d_k) \approx f_k + d_k^T \nabla f_k + \frac{1}{2} d_k^T \nabla^2 f_k d_k = m_k(d_k). \quad (3.14)$$

Όπως και στη μέθοδο της απότομης μείωσης, η βασική ιδέα της μεθόδου Newton έχει ως εξής: αντί να ελαχιστοποιήσουμε την f , ελαχιστοποιούμε το τετραγωνικό μοντέλο της $m_k(d_k)$, το οποίο κατασκευάζεται στην τρέχουσα επανάληψη x_k . Θεωρώντας ότι ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f_k$ είναι θετικά ορισμένος, ελαχιστοποιώντας ως προς d_k το τετραγωνικό μοντέλο m_k της f , αποκομίζουμε την κατεύθυνση Newton, δηλαδή

$$d_k^N = -(\nabla^2 f_k)^{-1} g_k.$$

Αξίζει να τονίσουμε ότι η κατεύθυνση Newton είναι αξιόπιστη όταν το τετραγωνικό μοντέλο m_k προσεγγίζει πολύ καλά την αντικειμενική συνάρτηση f . Συγκεκριμένα, συγκρίνοντας τις σχέσεις (2.3) και (3.14) παρατηρούμε ότι η μόνη διαφορά ανάμεσα τους έγκειται ότι ο πίνακας $\nabla^2 f(x + td)$ έχει αντικατασταθεί από τον $\nabla^2 f_k$. Αν η $\nabla^2 f$ είναι ομαλή τότε η διαφορά τους είναι της τάξης $O(\|d\|^3)$, το οποίο συνεπάγεται ότι αν η $\|d\|$ είναι πολύ μικρή τότε η προσέγγιση είναι αρκετά ακριβής.

Η κατεύθυνση Newton μπορεί να χρησιμοποιηθεί από μία μέθοδο γραμμικής αναζήτησης όταν ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f_k$ είναι θετικά ορισμένος, έτσι ώστε η κατεύθυνση Newton να είναι πάντα μία κατεύθυνση μείωσης. Στην αντίθετη περίπτωση, όπου ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f_k$ δεν είναι θετικά ορισμένος, η κατεύθυνση Newton είτε μπορεί να μην ορίζεται (μιας που μπορεί ο πίνακας $\nabla^2 f_k$ να είναι ιδιάζων) είτε η κατεύθυνση d_k να μην είναι κατεύθυνση μείωσης. Σ' αυτήν την περίπτωση, οι μέθοδοι γραμμικής αναζήτησης τροποποιούν την κατεύθυνση d έτσι ώστε για να ικανοποιείται η συνθήκη (2.8), ενώ ταυτόχρονα να διατηρούνται τα πλεοκτήματα από την άντληση πληροφορίας δεύτερης τάξης. Αντίθετα οι μέθοδοι καμπυλόγραμμης αναζήτησης, οι οποίες χρησιμοποιούν την κατεύθυνση Newton δεν απαιτούν ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f_k$ να είναι θετικά ορισμένος, μιας που το τετραγωνικό μοντέλο m_k της αντικειμενικής συνάρτησης (3.14) δεν είναι κάτω φραγμένο, με αποτέλεσμα να υπάρχει δυνατότητα μεγάλης μείωσης της τιμής της f , προς την κατεύθυνση αυτή.

Η μέθοδος γραμμικής αναζήτησης, η οποία χρησιμοποιεί την κατεύθυνση Newton συγκλίνει σε μία μόνο επανάληψη για όλες τις τετραγωνικές αντικειμενικές συναρτήσεις. Όμως, ένα πολύ βασικό της μειονέκτημα είναι ότι δεν έχει ολική σύγκλιση. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι η μέθοδος συγκλίνει μόνο όταν το αρχικό σημείο είναι αρκετά κοντά στο x^* .

Επίσης, ένα μειονέκτημα των μεθόδων, οι οποίες χρησιμοποιούν την κατεύθυνση Newton είναι ότι χρειάζονται δεύτερης τάξης πληροφορία, η οποία μπορεί είτε να μην είναι διαθέσιμη είτε ο υπολογισμός της να είναι απαγορευτικός σε μεγάλης κλίμακας προβλήματα, λόγω της χωρικής πολυπλοκότητάς της που είναι $O(n^2)$. Σε αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιούμε είτε τις Quasi-Newton μεθόδους είτε τις περιορισμένης μνήμης Quasi-Newton μεθόδους, αντίστοιχα.

3.6 Μέθοδοι Quasi-Newton

Οι Quasi-Newton μέθοδοι είναι μία κλάση μεθόδων, στις οποίες δεν χρειάζεται ο υπολογισμός του Εσσιανού πίνακα, αλλά μίας προσέγγισής του. Στηρίζονται στην ενημέρωση του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα με τρόπο που δεν απαιτεί μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Το μεγαλύτερο πλεονέκτημά τους είναι ότι δεν χρειάζονται τον υπολογισμό δευτέρων παραγώγων μιας και χρησιμοποιούν πληροφορία μόνο από την αντικειμενική συνάρτηση και τις παραγώγους πρώτης τάξης. Οι Quasi-Newton μέθοδοι μπορούμε να πούμε ότι γεννήθηκαν στα μέσα της δεκαετίας του '50 από τον Davidon [35]. Ο αλγόριθμος του Davidon αποτελεί τον πρώτο Quasi-Newton αλγόριθμο στην ιστορία της βελτιστοποίησης. Αρκετά αργότερα αποδείχτηκε από τους Powell [112] και Fletcher [44] ότι ο αλγόριθμος αυτός ήταν πολύ πιο γρήγορος και αξιόπιστος από τους ήδη υπάρχοντες αλγόριθμους μη γραμμικής βελτιστοποίησης. Αξίζει να αναφέρουμε ότι η μέθοδος του Davidon παρέμεινε για πάνω από τριάντα χρόνια τεχνική αναφορά, μέχρις ότου δημοσιεύτηκε επίσημα το 1991 [36]. Μέχρι σήμερα, πολλά επιστημονικά άρθρα ασχολούνται με αυτόν τον αλγόριθμο και προτείνονται παραλλαγές του.

Για να προσεγγίσουν οι μέθοδοι Quasi-Newton τον Εσσιανό πίνακα της αντικειμενικής συνάρτησης f με έναν συμμετρικό πίνακα, χρησιμοποιούν ένα τετραγωνικό μοντέλο της f , γύρω από μία συγκεκριμένη επανάληψη

$$f(x) \approx f_{k+1} + g_{k+1}^T(x - x_{k+1}) + \frac{1}{2}(x - x_{k+1})^T \nabla^2 f_{k+1}(x - x_{k+1}).$$

Η παράγωγος της προσέγγισης αυτής είναι

$$g(x) = g_{k+1} + \nabla^2 f_{k+1}(x - x_{k+1})$$

Θέτοντας $x = x_k$, $s_k = x_{k+1} - x_k$ και $y_k = g_{k+1} - g_k$, έχουμε ότι $\nabla^2 f_{k+1}^{-1} y_k \approx s_k$. Επίσης, αν η συνάρτηση f είναι κυρτή, τότε ισχύει

$$\nabla^2 f_{k+1}^{-1} y_k = s_k \quad \text{ή} \quad \nabla^2 f_{k+1} s_k = y_k.$$

Θεωρούμε τώρα το τετραγωνικό μοντέλο της f στο x_{k+1} .

$$m_{k+1}(x) = f_{k+1} + g_{k+1}^T(x - x_{k+1}) + \frac{1}{2}(x - x_{k+1})^T B_{k+1}(x - x_{k+1}).$$

όπου B_{k+1} είναι μία προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα στο x_{k+1} . Στο τετραγωνικό μοντέλο, αν θέσουμε όπου $x = x_{k+1}$, τότε ικανοποιούνται οι συνθήκες παρεμβολής

$$m_{k+1}(x_{k+1}) = f(x_{k+1}) \quad \text{και} \quad \nabla m_{k+1}(x_{k+1}) = g_{k+1}.$$

Επιπλέον, απαιτούμε να ισχύει η συνθήκη παρεμβολής $\nabla m_{k+1}(x_k) = g_k$, το οποίο συνεπάγεται τη συνθήκη $g_{k+1} + B_{k+1}(x_k - x_{k+1}) = g_k$. Έτσι έχουμε τη λεγόμενη *Quasi-Newton εξίσωση* (Quasi-Newton equation) ή αλλιώς *εξίσωση της τέμνουσας* (secant equation)

$$B_{k+1} s_k = y_k \tag{3.15}$$

ή ισοδύναμα

$$H_{k+1}y_k = s_k, \quad (3.16)$$

όπου H_{k+1} ο αντίστροφος του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα B_{k+1} . Δοθείσης δηλαδή της μετατόπισης s_k και της διαφοράς των κλίσεων y_k , η εξίσωση της τέμνουσας απαιτεί ο συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας B_{k+1} να απεικονίζει το s_k στο y_k . Αυτό είναι εφικτό, μόνο αν ισχύει η λεγόμενη συνθήκη καμπυλότητας

$$s_k^T y_k > 0, \quad (3.17)$$

δηλαδή, αν ο πίνακας B_{k+1} είναι θετικά ορισμένος. Όταν η συνθήκη καμπυλότητας (3.17) ικανοποιείται, η εξίσωση της τέμνουσας (3.15) έχει μοναδική λύση B_{k+1} .

Επομένως, στις Quasi-Newton μεθόδους είναι απαραίτητο να παράγουμε τον B_{k+1} ή τον αντίστροφό του H_{k+1} , με κάποιες συμφέρουσες μεθόδους, ώστε αφενός μεν να ισχύει η εξίσωση τέμνουσας (3.15) ή (3.16), αφετέρου δε να μην απαιτείται μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Γενικά, ένας τέτοιος πίνακας παράγεται ενημερώνοντας τον B_k (ή τον H_k) με κάποιο τρόπο, ώστε να παραχθεί ο B_{k+1} (ή ο H_{k+1} , αντίστοιχα). Σε όλες τις Quasi-Newton μεθόδους, ο αρχικός πίνακας B_0 (ή H_0) τίθεται να είναι είτε ο μοναδιαίος, δηλαδή $B_0 = I$ είτε ένα πολλαπλάσιό του $B_0 = \theta I$, $\theta \in \mathbb{R}^*$. Ο διαφορετικός τρόπος ενημέρωσης, χαρακτηρίζει τις διαφορετικές Quasi-Newton μεθόδους. Οι πιο γνωστές από αυτές είναι οι SR1, DFP, BFGS και PSB, οι οποίες αποτελούν την κλάση των Quasi-Newton ενημερώσεων.

3.6.1 Μέθοδοι Quasi-Newton Περιορισμένης Μνήμης

Οι Quasi-Newton ενημερώσεις δεν είναι εφαρμόσιμες για μεγάλης κλίμακας προβλήματα βελτιστοποίησης γιατί οι υπολογιστικές απαιτήσεις αυξάνονται αναλογικά του τετραγώνου της διάστασης του προβλήματος, δηλαδή $O(n^2)$. Γι' αυτό το λόγο αναπτύχθηκαν οι *περιορισμένης μνήμης Quasi-Newton μέθοδοι*, γνωστές στη διεθνή βιβλιογραφία ως *limited-memory Quasi-Newton methods* [100, 102]. Σε προβλήματα βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας, οι συγκεκριμένες μέθοδοι είναι οι πιο κατάλληλες για να προσεγγίσουν τον Εσσιανό πίνακα της αντικειμενικής συνάρτησης f .

Οι περιορισμένης μνήμης Quasi-Newton μέθοδοι χρησιμοποιούν πληροφορία καμπυλότητας μόνο από τις m πιο πρόσφατες επαναλήψεις, με σκοπό να κατασκευάσουν τον προσεγγιστικό Εσσιανό πίνακα. Η πληροφορία αυτή αποθηκεύεται σε m διανυσματικά ζεύγη $\{s_i, y_i\}$, όπου $i = k - m, k - m + 1, \dots, k - 1$. Συνεπώς, αποθηκεύονται μόνο μερικά n -διάστατα διανύσματα, αντί να αποθηκευθούν και να υπολογιστούν οι $n \times n$ προσεγγίσεις του Εσσιανού πίνακα. Αφού υπολογιστεί η νέα επανάληψη, το παλαιότερο ζεύγος από τα $\{s_i, y_i\}$ διαγράφεται και αντικαθίσταται από το καινούργιο ζεύγος $\{s_k, y_k\}$. Η επιλογή του αριθμού m των αποθηκευμένων ζευγών $\{s_i, y_i\}$, εξαρτάται τόσο από τη διάσταση του προβλήματος που έχουμε να λύσουμε, όσο και από τη μνήμη του υπολογιστή.

Η πιο γνωστή από τις Quasi-Newton μεθόδους περιορισμένης μνήμης είναι η περιορισμένης μνήμης BFGS μέθοδος, γνωστή ως L-BFGS [75, 100], της οποίας ο αντίστροφος

προσεγγιστικός πίνακας H_{k+1} δίνεται από τον τύπο

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= H_k + \left(1 + \frac{y_k^T H_k y_k}{s_k^T y_k}\right) \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{s_k y_k^T H_k + H_k y_k s_k^T}{s_k^T y_k} \\ &= \left(I - \frac{s_k y_k^T}{s_k^T y_k}\right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{s_k^T y_k}\right) + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k}. \end{aligned}$$

Θέτοντας

$$\rho_k = \frac{1}{s_k^T y_k} \quad \text{και} \quad V_k = I - \rho_k y_k s_k^T,$$

ο πίνακας H_{k+1} μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$H_{k+1} = V_k^T H_k V_k + \rho_k s_k s_k^T, \quad (3.18)$$

δηλαδή ο H_k ενημερώνεται χρησιμοποιώντας το ζεύγος $\{s_k, y_k\}$. Στην L-BFGS μέθοδο σώζουμε m ζεύγη (s_i, y_i) , $i = k-m, k-m+1, \dots, k-1$ για να ανακατασκευάσουμε τον H_k . Στην k επανάληψη, αφού διαλέξαμε έναν αρχικό πίνακα $H_k^{(0)}$, εφαρμόζοντας τον τύπο (3.18) επαναληπτικά m φορές, δηλαδή

$$H_k^{(j+1)} = V_{k-m+j}^T H_k^{(j)} V_{k-m+j} + \rho_{k-m+j} s_{k-m+j} s_{k-m+j}^T, \quad \text{με } j = 0, \dots, m-1,$$

οπότε λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} H_k &= (V_{k-1}^T \dots V_{k-m}^T) H_k^{(0)} (V_{k-m} V_{k-m+1} \dots V_{k-1}) \\ &\quad + \rho_{k-m} (V_{k-1}^T \dots V_{k-m+1}^T) s_{k-m} s_{k-m}^T (V_{k-m+1} \dots V_{k-1}) \\ &\quad + \rho_{k-m+1} (V_{k-1}^T \dots V_{k-m+2}^T) s_{k-m+1} s_{k-m+1}^T (V_{k-m+2} \dots V_{k-1}) \\ &\quad + \dots + \\ &\quad + \rho_{k-1} s_{k-1} s_{k-1}^T. \end{aligned}$$

Μία επιλογή του αρχικού πίνακα $H_k^{(0)}$ θα μπορούσε να είναι είτε ο μοναδιαίος, δηλαδή $H_k^{(0)} = I$ είτε ένα πολλαπλάσιό του, $H_k^{(0)} = \theta_k I$, με $\theta_k \in \mathbb{R}^*$.

3.6.2 Μέθοδοι Quasi-Newton Ελαχίστης Μνήμης

Οι Quasi-Newton ενημερώσεις ελάχιστης μνήμης [102] χρησιμοποιούνται ευρέως για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας [6, 19, 41]. Σε αυτές τις μεθόδους ο προηγούμενος προσεγγιστικός Εσσιανός πίνακας, πριν ενημερωθεί, αντικαθίσταται από το μοναδιαίο ή κάποιο πολλαπλάσιό του, ενώ μόνο το πιο πρόσφατο διανυσματικό ζεύγος (s_k, y_k) φυλάσσεται σε κάθε επανάληψη ($m = 1$). Επομένως, έχουμε μία ενημέρωση της μορφής

$$B_{k+1} = U(B_k^{(0)}, s_k, y_k)$$

όπου $B_{k+1}^{(0)} = \theta I$, με $\theta \in \mathbb{R}^*$ είναι ένας πίνακας, ο οποίος ενημερώνει τον προηγούμενο προσεγγιστικό Εσσιανό πίνακα.

Στη βιβλιογραφία, η BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης, αποτελεί τη διασημότερη και επικρατέστερη Quasi-Newton ενημέρωση ελάχιστης μνήμης. Η BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης, η οποία συμβολίζεται με $B^{(1)}$, ορίζεται από

$$B_{k+1}^{(1)} = \frac{1}{\theta_{k+1}} I - \frac{s_k s_k^T}{\theta_{k+1} s_k^T s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k}, \quad (3.19)$$

όπου $B_{k+1}^{(0)} = \theta_{k+1} I$, με $\theta_{k+1} \in \mathbb{R}^*$.

3.7 Μέθοδοι Μη Γραμμικών Συζυγών Κλίσεων

Στη διεθνή βιβλιογραφία, οι *μη γραμμικές μέθοδοι συζυγών κλίσεων* (nonlinear conjugate gradient methods) είναι ίσως οι πιο διάσημες μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης διάστασης. Αυτή η κλάση μεθόδων ορίζει την κατεύθυνση αναζήτησης ως το γραμμικό συνδυασμό της μείον κλίσης $-g_k$ και της προηγούμενης κατεύθυνσης αναζήτησης d_{k-1} , δηλαδή

$$d_k^{\text{CG}} = -g_k + \beta_k d_{k-1},$$

όπου το β_k είναι ένα βαθμωτό μέγεθος, το οποίο εξασφαλίζει ότι οι κατευθύνσεις μείωσης d_{k-1} και d_k είναι *συζυγή*, μία πολύ σημαντική έννοια στην ελαχιστοποίηση τετραγωνικών συναρτήσεων. Οι μέθοδοι των συζυγών κλίσεων αρχικά σχεδιάστηκαν για την επίλυση γραμμικών συστημάτων της μορφής, όπου ο πίνακας των συντελεστών είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Εφόσον, η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος είναι ισοδύναμη με την ελαχιστοποίηση μία θετικά ορισμένης τετραγωνικής συνάρτησης οι Fletcher και Reeves [45] τροποποίησαν την παραπάνω μέθοδο για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Με τα χρόνια, έχουν προταθεί πολλές παραλλαγές αυτού του πρωτότυπου σχήματος [31, 37, 44, 60, 102] και κάποιες αρκετές από αυτές χρησιμοποιούνται για την επίλυση πραγματικών προβλημάτων. Σε γενικές γραμμές τα βασικά πλεονεκτήματα των μεθόδων συζυγών κλίσεων είναι ότι δεν απαιτούν τον υπολογισμό ή την αποθήκευση του Εσσιανού πίνακα ή μίας προσέγγισης αυτού, είναι πιο αποτελεσματικές από τη μέθοδο της απότομης μείωσης και είναι πολύ απλές στην υλοποίηση τους.

Τα παραπάνω πλεονεκτήματα τους τις κατέστησαν ιδιαίτερα δημοφιλείς για την αποτελεσματική επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης διάστασης. Οι μη γραμμικές μέθοδοι συζυγών κλίσεων δεν επιτυγχάνουν τη γρήγορη τάξη σύγκλισης της μεθόδου Newton ή των μεθόδων Quasi-Newton, αλλά έχουν το πλεονέκτημα ότι δεν χρειάζεται να αποθηκεύουν πίνακες σε κάθε επανάληψη και είναι κατάλληλες για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας.

Μέθοδοι Μη Γραμμικών Συζυγών Κλίσεων

Οι μέθοδοι μη γραμμικών συζυγών κλίσεων (nonlinear conjugate gradient methods) αποτελούν τις διασημότερες μεθόδους επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης διάστασης εξαιτίας της απλότητας των επαναλήψεων τους, της αριθμητικής τους αποτελεσματικότητας και των ιδιοτήτων σύγκλισής τους.

Η κλασική μέθοδος γραμμικών συζυγών κλίσεων αρχικά προτάθηκε από τους Hestenes και Stiefel [64] τη δεκαετία του '50 ως εναλλακτική της απαλοιφής Gauss για την επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων. Εφόσον η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος είναι ισοδύναμη με την ελαχιστοποίηση μία θετικά ορισμένη τετραγωνικής συνάρτησης οι Fletcher και Reeves [45] τροποποίησαν την παραπάνω μέθοδο για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Με τα χρόνια, έχουν προταθεί πολλές παραλλαγές αυτού του πρωτότυπου σχήματος [31, 37, 44, 60, 102] και αρκετές από αυτές χρησιμοποιούνται για την επίλυση πραγματικών προβλημάτων [63, 116]. Σε γενικές γραμμές τα βασικά πλεονεκτήματα των μεθόδων συζυγών κλίσεων είναι ότι:

- Δεν απαιτούν τον υπολογισμό ή την αποθήκευση του Εσσιανού πίνακα.
- Δεν απαιτούν την αποθήκευση μίας προσέγγισης του Εσσιανού πίνακα.
- Είναι ταχύτερες από την μέθοδο της πιο απότομης μείωσης.

Τα παραπάνω πλεονεκτήματά τους τις κατέστησαν ιδιαίτερα δημοφιλείς για την αποτελεσματική επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης διάστασης. Η μέθοδος συζυγών κλίσεων [52, 63] είναι μία μέθοδος συζυγών κατευθύνσεων με μία πολύ ειδική ιδιότητα: Δημιουργώντας το σύνολο των συζυγών διανυσμάτων της, μπορεί να υπολογίσει ένα νέο διάνυσμα d_m χρησιμοποιώντας μόνο το προηγούμενο αποτέλεσμα d_{m-1} , χωρίς να χρειάζεται να γνωρίζει, όλα τα προηγούμενα στοιχεία $d_0, d_1, \dots, d_{m-1}$ του συνόλου συζυγίας. Το d_m είναι αυτομάτως συζυγές σε αυτά τα διανύσματα. Αυτή η αξιοσημείωτη ιδιότητα υποδηλώνει ότι η μέθοδος απαιτεί μικρή αποθήκευση και μικρό υπολογιστικό κόστος.

Στο εξής εκτίθενται οι λεπτομέρειες της μεθόδου συζυγών κλίσεων. Κάθε κατεύθυνση d_k επιλέγεται να είναι ένας γραμμικός συνδυασμός της μείον κλίσης $-g_k$ και της προηγούμενης κατεύθυνσης d_{k-1} , δηλαδή

Ορισμός 4.1. (Κατεύθυνση των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων).

$$d_k = \begin{cases} -g_0, & \text{για } k = 0; \\ -g_k + \beta_k d_{k-1}, & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (4.1)$$

όπου β_k είναι ένα βαθμωτό μέγεθος.

Οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων διαφέρουν στον τρόπο με τον οποίο ορίζουν την παράμετρο β_k . Στη διεθνή βιβλιογραφία έχουν προταθεί πολλές επιλογές της παραμέτρου β_k . Στην περίπτωση όπου η συνάρτηση είναι μία ισχυρά κυρτή τετραγωνική συνάρτηση και η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής τότε όλες οι επιλογές της παραμέτρου β_k είναι ισοδύναμες και η μέθοδος υποβιβάζεται στην κλασική γραμμική μέθοδο συζυγών κλίσεων. Σε αντίθετη περίπτωση κάθε επιλογή της παραμέτρου β_k οδηγεί σε διαφορετική μέθοδο συζυγών κλίσεων με διαφορετική υπολογιστική αποτελεσματικότητα και ιδιότητες σύγκλισης. Επίσης αξίζει να τονίσουμε ότι η σύγκλιση των μεθόδων συζυγών κλίσεων απαιτούν την ικανοποίηση των Υποθέσεων 3.1 και 3.2 και είναι στενά συνδεδεμένη με την επαρκή συνθήκη μείωσης, δηλαδή

$$g_k^T d_k = -c \|g_k\|^2, \quad (4.2)$$

όπου c είναι μία θετική σταθερά.

Στις επόμενες ενότητες θα παρουσιάσουμε συνοπτικά τις βασικότερες μη γραμμικές μεθόδους συζυγών κλίσεων ενώ περισσότερες πληροφορίες για την αριθμητική τους αποδοτικότητα και τις ιδιότητες σύγκλισής τους μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [1, 50, 60, 102].

4.1 Μέθοδος Hestenes-Stiefel

Όπως έχουμε αναφέρει οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων έχουν την ιδιότητα: οι κατευθύνσεις μείωσης d_{k-1} και d_k είναι συζυγής, δηλαδή

$$d_{k-1}^T H_{k-1} d_k = 0,$$

όπου ο H_{k-1} είναι ο Εσσιανός πίνακας της αντικειμενικής συνάρτησης f . Στη περίπτωση όμως όπου η f είναι τετραγωνική και ο H_{k-1} είναι σταθερός, δηλαδή $H_{k-1} = H$, για κάθε $k > 0$, τότε η παραπάνω σχέση είναι ισοδύναμη με την παρακάτω εξίσωση

$$d_k^T y_{k-1} = 0, \quad (4.3)$$

η οποία ονομάζεται *συνθήκη συζυγίας* (conjugacy condition). Έτσι συνδυάζοντας τη σχέση (4.1) με τη σχέση (4.3), αποκομίζουμε τη κατεύθυνση αναζήτησης της μεθόδου Hestenes Stiefel.

$$d_k = -g_k + \frac{g_k^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}} d_{k-1} \triangleq -g_k + \beta_k^{\text{HS}} d_{k-1}. \quad (4.4)$$

Ορισμός 4.2. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Hestenes-Stiefel).

$$\beta_k^{\text{HS}} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}}. \quad (4.5)$$

4.2 Μέθοδος Fletcher-Reeves

Όπως αναφέραμε οι Fletcher και Reeves τροποποίησαν την κλασσική γραμμική μέθοδο συζυγών κλίσεων για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης. Αν θεωρήσουμε ότι η f είναι τετραγωνική, τότε οι κλίσεις g_{k-1} και g_k είναι ορθογώνιες, δηλαδή $g_k^T g_{k-1} = 0$, άρα

$$g_{k-1}^T g_k = (g_k - g_{k-1})^T g_k = \|g_k\|^2.$$

Επίσης, θεωρώντας ότι η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής, τότε $g_{k-1}^T d_k = 0$, οπότε σε αυτή την περίπτωση η σχέση (4.4) μετατρέπεται στη

$$d_k = -g_k + \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2} d_{k-1} \triangleq -g_k + \beta_k^{\text{FR}} d_{k-1}.$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι γνωστή και ως κατεύθυνση αναζήτησης της μεθόδου Fletcher Reeves.

Ορισμός 4.3. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Fletcher-Reeves).

$$\beta_k^{\text{FR}} = \frac{\|g_k\|^2}{\|g_{k-1}\|^2}. \quad (4.6)$$

Εξαιτίας του δεύτερου όρου στη σχέση $d_k = -g_k + \beta_k^{\text{FR}} d_{k-1}$, η κατεύθυνση αναζήτησης d_k μπορεί να αποτύχει να είναι μία κατεύθυνση μείωσης, εκτός αν το μήκος βήματος α_k ικανοποιεί κάποιες συνθήκες. Συγκεκριμένα, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο της d_k με το διάνυσμα κλίσεως g_k , έχουμε

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2 + \beta_k^{\text{FR}} g_k^T d_{k-1}.$$

Στην περίπτωση όπου η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής, δηλαδή $g_k^T d_{k-1} = 0$ τότε από την παραπάνω σχέση έχουμε ότι $g_k^T d_k < 0$. Στη περίπτωση όμως όπου η γραμμική αναζήτηση δεν είναι ακριβής, ο δεύτερος όρος μπορεί να επικρατήσει του πρώτου όρου με αποτέλεσμα $g_k^T d_k \geq 0$, υποδηλώνοντας ότι το d_k είναι στην πραγματικότητα μία ανοδική κατεύθυνση. Ευτυχώς, μπορούμε να αποφύγουμε αυτήν την κατάσταση απαιτώντας το βήμα α_k να ικανοποιεί τις ισχυρές συνθήκες Wolfe (3.6) και (3.7).

Όσον αφορά την ολική σύγκλιση της μεθόδου Fletcher-Reeves έχει αποδειχτεί από τον Zoutendijk χρησιμοποιώντας ακριβή γραμμική αναζήτηση [147] και από τον Al-Balli [1] χρησιμοποιώντας μη ακριβή γραμμική αναζήτηση για μη κυρτές συναρτήσεις.

4.3 Μέθοδος Polak-Ribière

Στη διεθνή βιβλιογραφία έχουν προταθεί πολλές παραλλαγές της μεθόδου Fletcher-Reeves για την βελτιστοποίηση αντικειμενικών συναρτήσεων, οι οποίες διαφέρουν μεταξύ τους κυρίως στην επιλογή της παραμέτρου β_k . Η πιο σημαντική από αυτές τις παραλλαγές, προτάθηκε

από τους Polak και Ribière [110]. Συγκεκριμένα, χαλαρώνοντας την υπόθεση όσον αφορά την ορθογωνιότητα των διαδοχικών κλίσεων αλλά υποθέτοντας ότι η γραμμική είναι ακριβής, έχουμε ότι $d_{k-1}^T g_k = 0$ έτσι η σχέση (4.4) γίνεται

$$d_k = -g_k + \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} d_{k-1} \triangleq -g_k + \beta_k^{\text{PR}} d_{k-1}. \quad (4.7)$$

Ορισμός 4.4. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Polak-Ribière).

$$\beta_k^{\text{PR}} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}. \quad (4.8)$$

Σε γενικές γραμμές, η μέθοδος PR έχει παρόμοια συμπεριφορά με τη μέθοδο HS. Ο Powell [114] διατύπωσε ένα παράδειγμα σύμφωνα με το οποίο και οι δύο μέθοδοι μπορούν να παγιδευτούν και να συνεχίζουν τις επαναλήψεις τους επ' άπειρον χωρίς να παρουσιάζουν ουσιαστική πρόοδο, ακόμα και όταν η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής. Αυτό το παράδειγμα υποδηλώνει ότι και οι δύο μέθοδοι έχουν το μειονέκτημα ότι δεν συγκλίνουν ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις. Παρόλα όμως που και οι δύο μέθοδοι δεν συγκλίνουν ολικά, η αριθμητική τους αποτελεσματικότητα είναι πολύ ανώτερη από της μεθόδου FR.

Η φτωχή απόδοση της μεθόδου FR οφείλεται κατά ένα μεγάλο ποσοστό στο *φαινομένου του φρακαρίσματος* (jamming phenomenon) [113]. Συγκεκριμένα, όταν η μέθοδος FR δημιουργήσει μία «κακή» κατεύθυνση αναζήτησης, η οποία έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία ενός μικρού βήματος s_{k-1} αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία μίας εξίσου κακής κατεύθυνσης αναζήτησης. Αντίθετα, οι μέθοδοι PR και HS στην περίπτωση όπου το βήμα s_{k-1} είναι μικρό, επανεκκινούν αποφεύγοντας έτσι την εμφάνιση του φαινομένου.

Ιδιότητα (*). Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο PR-CG και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για όλα τα } k \geq 0,$$

τότε υπάρχουν σταθερές $b > 1$ και $\lambda > 0$ τέτοιες ώστε

$$|\beta_k^{\text{PR}}| \leq b$$

και

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \quad \Rightarrow \quad |\beta_k^{\text{PR}}| \leq \frac{1}{2b}.$$

Αξίζει να τονίζουμε ότι η Ιδιότητα(*) παρουσιάστηκε αρχικά από τους Gilbert και Nocedal [50], οι οποίοι απέδειξαν ότι ισχύει και για τη μέθοδο HS. Επίσης, για να διορθώσουν την

αποτυχία σύγκλισης της μεθόδου PR για μη κυρτές συναρτήσεις, οι Gilbert και Nocedal [50] παρουσίασαν μία εξαιρετική ανάλυση και πρότειναν την τροποποίηση της μεθόδου PR περιορίζοντας την παραμέτρο β_k^{PR} να είναι μη αρνητική.

Ορισμός 4.5. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Polak-Ribière+).

$$\beta_k^{\text{PR}+} = \max\{\beta_k^{\text{PR}}, 0\} \quad (4.9)$$

Με τον ίδιο τρόπο, οι Gilbert και Nocedal [50] τροποποίησαν και τη μέθοδο HS, για την εξασφάλιση της ολικής σύγκλισης της μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις. Σε πιο πρόσφατες εργασίες οι Dai et al. [29, 31] διατύπωσαν ότι είναι απαραίτητος ο περιορισμός της παραμέτρου ενημέρωσης β_k για την εξασφάλιση της σύγκλισης της μεθόδου. Στη βιβλιογραφία [32, 33, 50, 79, 81, 82, 137], έχουν προταθεί πάρα πολλές μέθοδοι συζυγών κλίσεων, οι οποίες βασίζονται στην ιδέα των Gilbert και Nocedal με ισχυρές θεωρητικές ιδιότητες και πολύ καλή υπολογιστική αποτελεσματικότητα.

4.4 Μέθοδος Perry

Η μέθοδος Perry [106] αποτελεί μία από τις πιο αποτελεσματικές μεθόδους συζυγών κλίσεων και έχει εφαρμοστεί σε αρκετές εφαρμογές [78, 81, 123]. Συγκεκριμένα, ο Perry παρατήρησε ότι η κατεύθυνση αναζήτησης της μεθόδου HS (4.4) μπορεί να γραφτεί στην παρακάτω μορφή

$$d_k = -g_k + \beta_k^{\text{HS}} d_{k-1} = -g_k + \frac{g_k^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}} d_{k-1} = - \left[I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right] g_k \triangleq -D_k^{\text{HS}} g_k$$

Ο πίνακας D_k^{HS} αποτελεί μία προσέγγιση του αντιστρόφου του Εσσιανού πίνακα αλλά δεν είναι συμμετρικός και δεν ικανοποιεί την εξίσωση της τέμνουσας (3.16). Γι' αυτό το λόγο δεν είναι μία Quasi-Newton ενημέρωση περιορισμένης μνήμης [100]. Επίσης, ο Perry παρατήρησε ότι στην περίπτωση όπου η γραμμική αναζήτηση δεν είναι ακριβής, είναι προτιμότερο η προσέγγιση του αντιστρόφου του Εσσιανού πίνακα να ικανοποιεί την εξίσωση της τέμνουσας (3.16) παρά τη συνθήκη συζυγίας (4.3). Έτσι πρόσθεσε τον όρο $s_k s_k^T / s_k^T y_k$ στον πίνακα D_k^{HS} , οπότε η κατεύθυνση αναζήτησης δίνεται από

$$d_k = - \left[I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k} + \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} \right] g_k \triangleq -D_k^{\text{P}} g_k.$$

Εύκολα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι ο πίνακας D_k^{P} ικανοποιεί τη συμμετρική της εξίσωσης της τέμνουσας, $y_k^T D_k^{\text{P}} = s_k$. Στη συνέχεια, γράφοντας την παραπάνω σχέση στη μορφή (4.1), έχουμε

$$d_k = -D_k^{\text{P}} g_k = -g_k + \frac{g_k^T (y_{k-1} - s_{k-1})}{y_{k-1}^T d_{k-1}} d_{k-1} \triangleq -g_k + \beta_k^{\text{P}} d_{k-1}$$

Συνοψίζοντας, η παράμετρος ενημέρωσης της μεθόδου του Perry δίνεται από την παρακάτω σχέση.

Ορισμός 4.6. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Perry).

$$\beta_k^P = \frac{g_k^T (y_{k-1} - s_{k-1})}{y_{k-1}^T d_{k-1}}. \quad (4.10)$$

Η μέθοδος συζυγών κλίσεων του Perry παρόλο που δεν αποδίδει πάντα καλύτερα από τις υπόλοιπες μεθόδους συζυγών κλίσεων, θα πρέπει να προτιμάται από αυτές για είναι πιο σταθερή και η απόδοσή της δεν εξαρτάται από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης.

Επιπλέον, μία εξαιρετική ιδιότητα της παραμέτρου ενημέρωσης του Perry (4.10), είναι ότι η κατεύθυνση αναζήτησης, η οποία ορίζεται από τις εξίσώσεις (4.1)-(4.10) αποτελεί τη λύση του ακόλουθου τετραγωνικού μοντέλου

$$\min_{d(\beta)} g_k^T d(\beta) + \frac{1}{2} d(\beta) B_k d(\beta), \quad (4.11)$$

όπου

$$d(\beta) = -g_k + \beta d_{k-1}$$

και B_k είναι ένας συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας, ο οποίος ικανοποιεί την εξίσωση της τέμνουσας (3.15). Πράγματι, θεωρώντας το παραπάνω τετραγωνικό μοντέλο, εφόσον $d(\beta) = -g_k + \beta d_{k-1}$, έχουμε

$$\begin{aligned} g_k^T d(\beta) + \frac{1}{2} d(\beta) B_k d(\beta) &= -\|g_k\| + \beta g_k^T d_{k-1} + \frac{1}{2} (-g_k + \beta d_{k-1})^T B_k (-g_k + \beta d_{k-1}) \\ &= (-\|g_k\|^2 + \frac{1}{2} g_k^T B_k g_k) + \beta (g_k^T d_{k-1} - g_k^T B_k d_{k-1}) + \frac{\beta^2}{2} d_{k-1}^T B_k d_{k-1}. \end{aligned}$$

Υπενθυμίζουμε ότι εφόσον ο B_k είναι θετικά ορισμένος, το ελάχιστο του τετραγωνικού μοντέλου (4.11) μπορεί να υπολογιστεί και στη συνέχεια να υπολογιστεί η αντίστοιχη βέλτιστη λύση για την παράμετρο β , δηλαδή

$$\beta = \frac{-g_k^T d_{k-1} + g_k^T B_k d_{k-1}}{d_{k-1}^T B_k d_{k-1}} = \frac{-g_k^T s_{k-1} + g_k^T B_k s_{k-1}}{d_{k-1}^T B_k s_{k-1}} = \frac{-g_k^T s_{k-1} + g_k^T y_{k-1}}{d_{k-1}^T y_{k-1}}.$$

4.5 Μέθοδος Dai-Liao

Πρόσφατα, οι Dai-Liao [30] πρότειναν μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων ακολουθώντας την ιδέα του Perry. Συγκεκριμένα, η μέθοδος βασίζεται στην εξίσωση της τέμνουσας (3.15), στην οποία βασίζονται και οι μέθοδοι Quasi-Newton. Αξίζει να υπενθυμίζουμε ότι για τις Quasi-Newton μεθόδους, μία προσέγγιση B_{k-1} του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f(x_{k-1})$ μίας μη γραμμικής συνάρτησης f ενημερώνεται έτσι ώστε ο νέος πίνακας B_k να ικανοποιεί την εξίσωση της τέμνουσας, δηλαδή

$$B_k s_{k-1} = y_{k-1}. \quad (4.12)$$

Επίσης, για τις μεθόδους Quasi-Newton, υπενθυμίζουμε ότι η κατεύθυνση αναζήτησης υπολογίζεται από τη σχέση

$$d_k = -B_k^{-1} g_k. \quad (4.13)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (4.12) και (4.13), έχουμε

$$d_k^T y_{k-1} = -g_k^T s_{k-1}. \quad (4.14)$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση, οι Dai και Liao αντικατέστησαν την συνθήκη συζυγίας (4.3) με την παρακάτω συνθήκη

$$d_k^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}. \quad (4.15)$$

όπου $t \geq 0$. Αν $t = 0$ τότε η παραπάνω σχέση υποβιβάζεται στην συνθήκη συζυγίας (4.3) ενώ αν $t = 1$ υποβιβάζεται στη σχέση (4.14). Έτσι, αντικαθιστώντας τη σχέση (4.1) στη σχέση (4.15), έχουμε

$$-g_k^T y_{k-1} + \beta_k d_{k-1}^T y_{k-1} = -t g_k^T s_{k-1}.$$

Αναδιατάσσοντας τους όρους της παραπάνω εξίσωσης προκύπτει η παράμετρος ενημέρωσης της μεθόδου Dai και Liao.

Ορισμός 4.7. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Dai-Liao).

$$\beta_k^{\text{DL}} = \frac{g_k^T (y_{k-1} - t s_{k-1})}{y_{k-1}^T d_{k-1}}. \quad (4.16)$$

όπου $t \geq 0$.

Επίσης για την εξασφάλιση της ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις, οι Dai και Liao πρότειναν το περιορισμό του πρώτου όρου της σχέσης (4.16) να είναι μη αρνητικός [30].

Ορισμός 4.8. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Dai-Liao+).

$$\beta_k^{\text{DL}+} = \max \left\{ \frac{g_k^T y_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}}, 0 \right\} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{y_{k-1}^T d_{k-1}}. \quad (4.17)$$

όπου $t \geq 0$.

Οι μέθοδοι DL και DL+ έχουν μελετηθεί ιδιαίτερα στη βιβλιογραφία και έχουν προταθεί αρκετές παραλλαγές τους, οι οποίες έχουν ισχυρές θεωρητικές ιδιότητες και αρκετές από αυτές αρκετά καλή υπολογιστική αποτελεσματικότητα [13, 48, 73, 80, 133, 140, 143, 146]. Παρόλα αυτά, τα μειονέκτημα της μεθόδου αποτελούν η μη εξασφάλιση της δημιουργίας κατευθύνσεων μείωσης και η εύρεση της βέλτιστης τιμής της παραμέτρου t , η οποία παραμένει ένα ανοιχτό θέμα [30, 80, 133].

4.6 Φασματική Μέθοδος Συζυγών Κλίσεων

Οι Birgin και Martínez [18] πρότειναν τη κλάση μεθόδων των *φασματικών συζυγών κλίσεων* (spectral conjugate gradient methods) συνδυάζοντας τη κλασική μέθοδο μη γραμμικών συζυγών κλίσεων με την φασματική κλίση των Barzilai και Borwein [14]. Συγκεκριμένα, η κατεύθυνση αναζήτησης της νέας κλάσης μεθόδων υπολογίζεται ως ο γραμμικός συνδυασμός της φασματικής κλίσης και της προηγούμενης κατεύθυνσης αναζήτησης.

Ορισμός 4.9. (Κατεύθυνση των Φασματικών Συζυγών Κλίσεων).

$$d_k = \begin{cases} -g_0 & \text{για } k = 0; \\ -\frac{1}{\delta_k} g_k + \beta_k d_{k-1}, & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (4.18)$$

όπου δ_k είναι ένα βαθμωτό μέγεθος.

Επίσης, οι Birgin και Martínez παρουσίασαν κάποια ενθαρρυντικά αποτελέσματα αν η παράμετρος δ_k είναι η *φασματική παράμετρος* των Barzilai και Borwein [14], γνωστή και ως BB spectral parameter

$$\delta_k = \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{s_{k-1}^T s_{k-1}}, \quad (4.19)$$

η οποία ελαχιστοποιεί την ποσότητα $\|\delta s_k - y_k\|$ παρέχοντας μία προσέγγιση δύο σημείων στην εξίσωση της τέμνουσας (3.15). Ουσιαστικά, η παράμετρος αυτή είναι η ποσότητα Rayleigh

$$\frac{s_{k-1}^T \left[\int_0^1 \nabla^2 f(x_{k-1} + \delta s_{k-1}) d\delta \right] s_{k-1}}{s_{k-1}^T s_{k-1}},$$

η οποία παίρνει τιμές ανάμεσα στη μικρότερη και στη μεγαλύτερη ιδιοτιμή του μέσου Εσσιανού πίνακα $\int_0^1 \nabla^2 f(x_{k-1} + \delta s_{k-1}) d\delta$.

Χρησιμοποιώντας τη γεωμετρική ερμηνεία για την ελαχιστοποίηση της τετραγωνικής συνάρτησης, οι Birgin και Martínez πρότειναν την παρακάτω σχέση για τον υπολογισμό της παραμέτρου ενημέρωσης β_k στη σχέση (4.18)

$$\beta_k^{\text{SP}} = \frac{g_k^T (y_{k-1} - \delta_k s_{k-1})}{\delta_k y_{k-1}^T d_{k-1}}.$$

Προφανώς για $\delta_k = 1$, η παραπάνω σχέση υποβιβάζεται στη παράμετρο ενημέρωσης του Perry (4.10). Επιπλέον, οι Birgin και Martínez επέκτειναν την ιδέα τους και στις υπόλοιπες

κλασικές μεθόδους συζυγών κλίσεων, δηλαδή

$$\beta_k^{\text{SHS}} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\delta_k y_{k-1}^T d_{k-1}}, \quad (4.20)$$

$$\beta_k^{\text{SFR}} = \frac{\delta_{k-1} \|g_k\|^2}{\delta_k \|g_{k-1}\|^2}, \quad (4.21)$$

$$\beta_k^{\text{SPR}} = \frac{\delta_{k-1} g_k^T y_{k-1}}{\delta_k \|g_{k-1}\|^2}, \quad (4.22)$$

οι οποίες αποτελούν τη φασματική παράμετρο HS, τη φασματική παράμετρο FR και τη φασματική παράμετρο PR, αντίστοιχα.

Παρά την υπολογιστική αποτελεσματικότητα των φασματικών μεθόδων συζυγών κλίσεων δυστυχώς όμως οι μέθοδοι, οι οποίες ανήκουν σε αυτή τη κλάση μεθόδων, δεν μπορούν να εγγραφούν τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης, γι' αυτό το λόγο χρησιμοποιούν επανεκκινήσεις για την εξασφάλιση της σύγκλισης.

4.7 Βελτίωση της Αποδοτικότητας και των Ιδιοτήτων Σύγκλισης των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων

Μπορεί οι μη γραμμικές μέθοδοι συζυγών κλίσεων να αποτελούν τις πιο διάσημες μεθόδους επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης μεγάλης κλίμακας παρόλα αυτά, τα βασικά μειονεκτήματα αυτών των μεθόδων είναι τα εξής:

1. Η αδυναμία εξασφάλισης της επαρκούς συνθήκης μείωσης (4.2), με αποτέλεσμα τη χρήση επανεκκινήσεων γιατί την εξασφάλιση της σύγκλισης. Εν τούτοις, υπάρχει επίσης μία ανησυχία όσον αφορά τις μεθόδους, οι οποίες χρησιμοποιούν επανεκκινήσεις. Συγκεκριμένα, αν οι επανεκκινήσεις προκαλούνται πολύ συχνά τότε υπάρχει σοβαρός κίνδυνος υποβιβασμού της αποδοτικότητας της μεθόδου [101]. Δηλαδή, στην περίπτωση όπου η μέθοδος επανεκκινεί, μία τέτοια επιλογή δεν θα είναι απαραίτητα αποτελεσματική για την αποδοτικότητα της μεθόδου μιας που η τελευταία υποβιβάζεται στην μέθοδο της απότομης μείωσης. Ως εκ τούτου, δεν είναι «σοφό» να επανεκκινηθεί η μέθοδος εγκαταλείποντας όλες τις πληροφορίες δεύτερης τάξης για την αντικειμενική συνάρτηση [113].
2. Η αδυναμία των περισσότερων μεθόδων συζυγών κλίσεων να εξασφαλίσουν ολική σύγκλιση για μη κυρτές συναρτήσεις. Όπως αναφέραμε αν μία μέθοδος συζυγών κλίσεων, η οποία δεν συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις υπάρχει πολύ σοβαρός κίνδυνος οι επαναλήψεις της μεθόδου να συνεχίζονται επ' άπειρον χωρίς η μέθοδος να παρουσιάζει ουσιαστική πρόοδο [114].

Γι' αυτό το λόγο, τα τελευταία δέκα χρόνια η έρευνα έχει επικεντρωθεί στην ανάπτυξη νέων μεθόδων συζυγών κλίσεων, οι οποίες δεν θα διαθέτουν μόνο ισχυρά θεωρητικά αποτελέσματα αλλά και η υπολογιστική τους αποτελεσματικότητα είναι ανώτερη από αυτή των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων. Αυτές οι νέες μέθοδοι μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε δύο κλάσεις.

1. Στις μέθοδους συζυγών κλίσεων, οι οποίες εκμεταλεύονται τα θεωρητικά πλεονεκτήματα τροποποιημένων εξισώσεων της τέμνουσας.
2. Στις μέθοδους συζυγών κλίσεων, οι οποίες εγγυώνται τη δημιουργία καθοδικών κατευθύνσεων.

4.7.1 Τροποποίηση των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων Χρησιμοποιώντας Νέες Εξισώσεις της Τέμνουσας

Τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί πάρα πολλές μέθοδοι συζυγών κλίσεων, οι οποίες εκμεταλλεύονται τα θεωρητικά πλεονεκτήματα τροποποιημένων εξισώσεων της τέμνουσας. Ενδεικτικά παρουσιάζουμε τις σημαντικότερες από αυτές. Συγκεκριμένα, οι Ford et al. [48] πρότειναν μία πολυ-βηματική μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία βασίζεται στις πολυ-βηματικές μεθόδους Quasi-Newton [46, 47]. Επίσης, οι Zhang et al. [140, 143, 146] πρότειναν μία τροποποίηση της μεθόδου DL βασιζόμενοι στην MBFGS εξίσωση της τέμνουσας [71]. Πρόσφατα, οι Yabe και Takano [133], οι Li et al. [73] και οι Babaie-Kafaki et al. [13] πρότειναν κάποιες νέες μεθόδους συζυγών κλίσεων που χρησιμοποιούν τροποποιημένες εξισώσεις της τέμνουσας, οι οποίες προσεγγίζουν την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης με μεγαλύτερη ακρίβεια.

Δυστυχώς όμως οι περισσότερες από αυτές τις μεθόδους δεν εξασφαλίζουν τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης οπότε οι μέθοδοι επανεκκινούν για την εξασφάλιση της σύγκλισης. Στη συνέχεια της εργασίας, παρουσιάζουμε τις διασημότερες τροποποιημένες εξισώσεις της τέμνουσας που έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία.

4.7.1.1 Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Li et al.

Οι Wei et al. [128] παρατήρησαν ότι η κλασική εξίσωση της τέμνουσας (4.12) εκμεταλλεύεται μόνο δύο κλίσεις, ενώ δεν λαμβάνονται υπόψη οι συναρτησιακοί υπολογισμοί. Αναπτύσσοντας τη συνάρτηση f και την κλίση της κατά Taylor στο $x_{k-1} = x_k - s_{k-1}$, πρότειναν μία νέα κλάση εξισώσεων της τέμνουσας ως εξής.

$$f_{k-1} \simeq f_k - g_k^T s_{k-1} + \frac{1}{2} s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1}.$$

Άρα

$$\begin{aligned} s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1} &\simeq 2(f_{k-1} - f_k) + (g_k + g_{k-1})^T s_{k-1} \\ &= 2(f_{k-1} - f_k) + (g_k + g_{k-1})^T s_{k-1} + s_{k-1}^T y_{k-1}. \end{aligned}$$

Θεωρώντας ότι ο πίνακας B_k είναι η προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f_k$, έχουμε

$$s_{k-1}^T B_k s_{k-1} = s_{k-1}^T y_{k-1} + \hat{\theta}_{k-1},$$

όπου

$$\hat{\theta}_{k-1} = 2(f_{k-1} - f_k) + (g_k + g_{k-1})^T s_{k-1}. \quad (4.23)$$

Έτσι πρότειναν την παρακάτω τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας.

Ορισμός 4.10. (Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Wei et al.).

$$B_k s_{k-1} = \hat{y}_{k-1}, \quad \hat{y}_{k-1} = y_{k-1} + \frac{\hat{\theta}_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2} s_{k-1}, \quad (4.24)$$

όπου το $\hat{\theta}_{k-1}$ ορίζεται από την (4.23).

Τα θεωρητικά πλεονεκτήματα αυτής νέας εξίσωσης της τέμνουσας (4.24) μπορούν να φανούν από το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 4.1. [128]. Έστω μία συνάρτηση f δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη και ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(x)$ είναι συνεχής κατά Lipschitz σε ένα ανοιχτό σύνολο, το οποίο περιέχει τα x_{k-1} και x_k . Αν η ποσότητα $\|s_{k-1}\|$ είναι αρκετά μικρή, τότε έχουμε

$$s_{k-1}^T (\nabla^2 f_k s_{k-1} - \hat{y}_{k-1}) = \frac{1}{3} s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^4)$$

και

$$s_{k-1}^T (\nabla^2 f_k s_{k-1} - y_{k-1}) = \frac{1}{2} s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^3),$$

όπου το $\hat{y}_k$ ορίζεται από τη σχέση (4.24) και T_k είναι ο τανυστής της f στο x_k και

$$s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} = \sum_{i,j,l=1}^n \frac{\partial^3 f(x_k)}{\partial x^i \partial x^j \partial x^l} s_{k-1}^i s_{k-1}^j s_{k-1}^l$$

Επίσης, αν η f είναι αυστηρά κυρτή και η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής, τότε η τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.24) υποβιβάζεται στη κλασική εξίσωση της τέμνουσας (4.12).

Παρόλα αυτά η τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.24) έχει το μειονέκτημα ότι δεν εγγυάται ότι η ποσότητα $s_{k-1}^T \hat{y}_{k-1}$ θα είναι πάντα διάφορη του μηδενός ακόμα και αν η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5). Το πρόσημο αυτής της ποσότητας είναι εξαιρετικά σημαντικό για αρκετές μέθοδοι συζυγών κλίσεων (όπως η HS, PR, Perry, DL κ.α.) έτσι ώστε οι αντίστοιχες παράμετροι ενημέρωσης να είναι καλά ορισμένες. Γι' αυτό το λόγο οι Li et al. [73] πρότειναν μία παραλλαγή της τροποποιημένης εξίσωσης της τέμνουσας (4.24), ως εξής.

Ορισμός 4.11. (Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Li et al.).

$$B_k s_{k-1} = \hat{y}_{k-1}^*, \quad \hat{y}_{k-1}^* = y_{k-1} + \frac{\max\{\hat{\theta}_{k-1}, 0\}}{\|s_{k-1}\|^2} s_{k-1},$$

όπου το $\hat{\theta}_{k-1}$ ορίζεται από την (4.23).

Προφανώς για την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας των Li et al. μπορούμε να αποκομίσουμε ένα παρόμοιο αποτέλεσμα με αυτό του Θεώρηματος 4.1.

4.7.1.2 Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Babaie et al.

Ανεξάρτητα από τους Wei et al. [128] και Li et al. [73], οι Zhang et al. [138, 139] επεκτείνουν την εξίσωση της τέμνουσας (4.12) πρότειναν μία νέα κλάση εξισώσεων της τέμνουσας ως εξής. Αναπτύσσοντας την συνάρτηση f και την κλίση της κατά Taylor στο $x_{k-1} = x_k - s_{k-1}$, έχουμε

$$f_{k-1} = f_k - g_k^T s_{k-1} + \frac{1}{2} s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1} - \frac{1}{6} s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^4)$$

$$g_{k-1}^T s_{k-1} = g_k^T s_{k-1} - s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1} + \frac{1}{2} s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^4)$$

όπου

$$s_{k-1}^T (T_k s_{k-1}) s_{k-1} = \sum_{i,j,l=1}^n \frac{\partial^3 f(x_k)}{\partial x^i \partial x^j \partial x^l} s_{k-1}^i s_{k-1}^j s_{k-1}^l$$

Απαλείφοντας τους όρους, οι οποίοι περιέχουν ένα τανυστή, έχουμε

$$s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1} = (g_k - g_{k-1})^T s_{k-1} + 6(f_{k-1} - f_k) + 3(g_k + g_{k-1})^T s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^4).$$

Εφόσον ο όρος $s_{k-1}^T B_{k-1} s_{k-1}$ πρέπει να προσεγγίζει την κυρτότητα του Εσσιανού $\nabla^2 f_k$, οι Zhang και Xu [139] μελέτησαν την εξίσωση

$$s_{k-1}^T B_{k-1} s_{k-1} = s_{k-1}^T y_{k-1} + \tilde{\theta}_{k-1}$$

όπου

$$\tilde{\theta}_{k-1} = 6(f_{k-1} - f_k) + 3(g_k + g_{k-1})^T s_{k-1}. \quad (4.25)$$

Έτσι πρότειναν την παρακάτω τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας.

Ορισμός 4.12. (Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Zhang et al.).

$$B_k s_{k-1} = \tilde{y}_{k-1}, \quad \tilde{y}_{k-1} = y_{k-1} + \frac{\tilde{\theta}_{k-1}}{s_{k-1}^T u} u, \quad (4.26)$$

όπου το u είναι ένα διάνυσμα τέτοιο ώστε $s_{k-1}^T u > 0$ και το $\tilde{\theta}_{k-1}$ ορίζεται από την (4.25).

Αξίζει να τονίσουμε ότι η νέα εξίσωση της τέμνουσας (4.26) δεν περιέχει μόνο πληροφορίες από δυο κλίσεις της συνάρτησης f αλλά και πληροφορίες από συναρτησιακούς υπολογισμούς της f στο x_{k-1} και x_k . Επιπλέον, για την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.26) οι Zhang et al. [138] παρουσίασαν το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 4.2. [139]. Έστω ότι συνάρτηση f είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη και ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(x)$ είναι συνεχής κατά Lipschitz σε ένα ανοιχτό σύνολο, το οποίο περιέχει τα x_{k-1} και x_k . Αν η ποσότητα $\|s_{k-1}\|$ είναι αρκετά μικρή, τότε για κάθε διάνυσμα u τέτοιο ώστε $s_{k-1}^T u \neq 0$, ισχύουν οι παρακάτω εξισώσεις:

$$\begin{aligned} s_{k-1}^T (\nabla^2 f_k s_{k-1} - y_{k-1}) &= O(\|s_{k-1}\|^3), \\ s_{k-1}^T (\nabla^2 f_k s_{k-1} - \tilde{y}_{k-1}) &= O(\|s_{k-1}\|^4). \end{aligned}$$

Προφανώς, από παραπάνω το θεώρημα συνεπάγεται ότι η ποσότητα $s_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}$ προσεγγίζει την κυριότητα $s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1}$ με μεγαλύτερη ακρίβεια από την ποσότητα $s_{k-1}^T y_{k-1}$. Ωστόσο η τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.26) έχει δύο βασικά μειονεκτήματα:

1. Δεν εγγυάται ότι η ποσότητα $s_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}$ θα είναι πάντα θετική ακόμα και αν η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5).
2. Με βάση το Θεώρημα 4.3, στη περίπτωση όπου $\|s_{k-1}\| > 1$ η κλασική εξίσωση της τέμνουσας (4.12) αναμένεται να είναι πιο ακριβής από την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.26).

Για να αντιμετωπίσουν τα παραπάνω προβλήματα οι Babaie-Kafaki et al. [13] πρότειναν μία παραλλαγή της (4.26) ως εξής:

Ορισμός 4.13. (Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας των Babaie-Kafaki et al.).

$$B_k s_{k-1} = \tilde{y}_{k-1}^*, \quad \tilde{y}_{k-1}^* = y_{k-1} + \rho_k \frac{\max\{\tilde{\theta}_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^T u} u, \quad (4.27)$$

όπου το $\rho_k \in [0, 1]$ είναι μία παράμετρος, το u είναι ένα διάνυσμα τέτοιο ώστε $s_{k-1}^T u > 0$ και το $\tilde{\theta}_{k-1}$ ορίζεται από την (4.25).

Αξίζει να τονίσουμε ότι το Θεώρημα 4.3 ισχύει και για την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (4.27). Συγκεκριμένα, από το Θεώρημα 4.3 γνωρίζουμε ότι

$$s_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1} - s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1} = s_{k-1}^T y_{k-1} + \tilde{\theta}_k + O(\|s_{k-1}\|^4) \quad \text{και} \quad |\tilde{\theta}_{k-1}| = O(\|s_{k-1}\|^3).$$

Έτσι χρησιμοποιώντας τις παραπάνω σχέσεις με την (4.27) και τον περιορισμό ότι η παράμετρος $\rho_k \in [0, 1]$, αποκομίζουμε ότι

$$\begin{aligned} |s_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^* - s_{k-1}^T \nabla^2 f_k s_{k-1}| &= |\rho_k \max\{\tilde{\theta}_{k-1}, 0\} - \tilde{\theta}_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^4)| \\ &\leq \begin{cases} |(\rho_k - 1)\tilde{\theta}_{k-1}| + O(\|s_{k-1}\|^4), & \text{αν } \tilde{\theta}_{k-1} > 0; \\ |\tilde{\theta}_{k-1}| + O(\|s_{k-1}\|^4) = O(\|s_{k-1}\|^3), & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \end{aligned}$$

4.7.1.3 Η MBFGS Εξίσωση της Τέμνουσας

Οι Li και Fukushima [71, 72] πρότειναν μία τροποποίηση της μεθόδου BFGS και δημιούργησαν μία τροποποιημένη μέθοδο BFGS (MBFGS), η οποία συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις χρησιμοποιώντας τη συνθήκη Armijo (3.3) ή τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5). Συγκεκριμένα, η μέθοδός τους βασίζεται στην παρακάτω εξίσωση της τέμνουσας.

Ορισμός 4.14. (MBFGS Τροποποιημένη Εξίσωση της Τέμνουσας).

$$B_k s_{k-1} = z_{k-1}, \quad z_{k-1} = y_{k-1} + h_{k-1} \|g_{k-1}\|^r s_{k-1}, \quad (4.28)$$

όπου $r > 0$ και

$$h_{k-1} = t + \max \left\{ -\frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2}, 0 \right\} \|g_{k-1}\|^{-r}, \quad (4.29)$$

και t μία θετική παράμετρος.

Ουσιαστικά η παραπάνω τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας των Li και Fukushima (4.28) αποτελεί την κλασική εξίσωση της τέμνουσας για την βοηθητική συνάρτηση

$$f_a(x) = f(x) + h_{k-1} \frac{\|g_k\|^r}{2} \|x - x^*\|^2,$$

όπου το x^* είναι η βέλτιστη λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης (1.2). Προφανώς το x^* είναι και η βέλτιστη λύση του προβλήματος

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

Θεώρημα 4.3. . Έστω ότι συνάρτηση f_a είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη και ο Εσσιανός πίνακας $\nabla^2 f(x)$ είναι συνεχής κατά Lipschitz σε ένα ανοιχτό σύνολο, το οποίο περιέχει τα x_{k-1} και x_k . Αν η ποσότητα $\|s_{k-1}\|$ είναι αρκετά μικρή, τότε ισχύει

$$s_{k-1}^T (\nabla^2 f_a(x_k) s_{k-1} - z_{k-1}) = \frac{1}{2} s_{k-1}^T (T_{a_{k+1}} s_{k-1}) s_{k-1} + O(\|s_{k-1}\|^3),$$

όπου

$$s_{k-1}^T (T_{a_{k+1}} s_{k-1}) s_{k-1} = \sum_{i,j,l=1}^n \frac{\partial^3 f_a(x_k)}{\partial x^i \partial x^j \partial x^l} s_{k-1}^i s_{k-1}^j s_{k-1}^l.$$

Επιπλέον, ένα ακόμα πλεονέκτημα της τροποποιημένης εξίσωση της τέμνουσας (4.28) είναι ότι η ποσότητα $s_{k-1}^T z_{k-1}$ είναι πάντα θετική, ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης, δηλαδή

$$\begin{aligned} s_{k-1}^T z_{k-1} &= s_{k-1}^T y_{k-1} + t \|g_{k-1}\|^r \|s_{k-1}\|^2 + \max \left\{ -\frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2}, 0 \right\} \|s_{k-1}\|^2 \\ &\geq t \|g_{k-1}\|^r \|s_{k-1}\|^2 > 0. \end{aligned}$$

4.7.2 Τροποποίηση των Μεθόδων Συζυγών Κλίσεων για την Εξασφάλιση Επαρκής Μείωσης

Η δεύτερη κλάση μεθόδων συζυγών κλίσεων περιλαμβάνει μεθόδους, οι οποίες ικανοποιούν την επαρκή συνθήκη μείωσης (4.2) για την αποφυγή επανεκκινήσεων.

Οι Hager και Zhang [58, 59] πρότειναν μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία ονομάζεται CG-Descent και ικανοποιεί την επαρκή συνθήκη μείωσης (4.2), χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε γραμμική αναζήτηση. Συγκεκριμένα, η μέθοδος τους μπορεί να θεωρηθεί σαν μία τροποποίηση του τύπου των Hestenes-Stiefel (4.5) προσθέτοντας τον όρο $-\mu g_k^T d_{k-1}$, όπου $\mu = 2\|y_{k-1}\|^2 / (y_{k-1}^T d_{k-1})^2$, δηλαδή

$$\beta_k^{\text{HZ}} = \max\{\beta_k^{\text{N}}, \xi_k\},$$

όπου

$$\beta_k^{\text{N}} = \beta_k^{\text{HS}} - 2 \frac{\|y_{k-1}\|^2}{(d_{k-1}^T y_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}, \quad \xi_k = -\frac{1}{\|d_k\|^2 \min\{\|g_k\|, \xi\}}$$

και $\xi > 0$ είναι μία θετική σταθερά. Μία πολύ σημαντική ιδιότητα της μεθόδου CG-Descent είναι ότι ικανοποιεί την εξίσωση $g_k^T d_k = -\frac{7}{8} \|g_k\|^2$, ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Τέλος, στην περίπτωση όπου η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5), η μέθοδος συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις.

Χρησιμοποιώντας την ιδέα των Hager και Zhang, οι Yu et al. [134, 135] παρουσίασαν μία νέα κλάση μεθόδων φασματικών συζυγών κλίσεων, η οποία εγγυάται τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε γραμμική αναζήτηση.

$$\begin{aligned}\beta_k^{\text{DSHS}} &= \beta_k^{\text{SHS}} - \frac{C\|y_{k-1}\|^2}{\delta_k(y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}, \\ \beta_k^{\text{DSFR}} &= \beta_k^{\text{SFR}} - \frac{C\delta_{k-1}^2\|g_k\|^2}{\delta_k\|g_{k-1}\|^4} g_k^T d_{k-1}, \\ \beta_k^{\text{DSPR}} &= \beta_k^{\text{SPR}} - \frac{C\delta_{k-1}^2\|y_{k-1}\|^2}{\delta_k\|g_{k-1}\|^4} g_k^T d_{k-1}, \\ \beta_k^{\text{DSP}} &= \beta_k^{\text{SP}} - \frac{C\|y_{k-1} - s_{k-1}\|^2}{\delta_k(y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}.\end{aligned}$$

Η παράμετρος C ουσιαστικά ρυθμίζει το σχετικό βάρος μεταξύ της συζυγίας και της μείωσης και στην περίπτωση όπου $C > 1/4$ τότε ικανοποιείται η επαρκής συνθήκη μείωσης (4.2) ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης.

Επίσης, οι παραπάνω μέθοδοι παρουσιάζουν μεγαλύτερη υπολογιστική αποτελεσματικότητα από τις αντίστοιχες φασματικές μεθόδους συζυγών και επίσης είναι ανταγωνιστικές συγκριτικά με την CG-Descent [134, 135]. Το μειονέκτημα όμως αυτής της νέας κλάσης μεθόδων είναι ότι συγκλίνουν ολικά μόνα για ισχυρά κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe [135].

Πρόσφατα, ο Zhang et al. [142] ακολούθησε μία διαφορετική στρατηγική από αυτή των Hager και Zhang για τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης. Συγκεκριμένα, χρησιμοποίησε ένα παρόμοιο σχήμα με αυτό των φασματικών μεθόδων συζυγών κλίσεων [18] και τροποποίησε την κατεύθυνση μείωσης έτσι ώστε να εξασφαλίσει επαρκή μείωση, δηλαδή $g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$. Συγκεκριμένα, πρότειναν μία τροποποίηση της μεθόδου FR, ως εξής:

$$d_k = -\frac{d_{k-1}^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} g_k + \beta_k^{\text{FR}} d_{k-1}. \quad (4.30)$$

Μία σημαντική ιδιότητα αυτής της μεθόδου είναι ότι εγγυάται επαρκή μείωση, $g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$, ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Επιπλέον, η τροποποιημένη μέθοδος FR υποδιβάζεται στην κλασική μέθοδο FR στην περίπτωση όπου η γραμμική αναζήτηση είναι ακριβής. Επίσης, αναδιατάσσοντας την σχέση (4.30), έχουμε

$$d_k = -\left(1 + \beta_k^{\text{FR}} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|}\right) g_k + \beta_k^{\text{FR}} d_{k-1}. \quad (4.31)$$

Στην περίπτωση, όπου αντικαταστήσουμε την παράμετρο ενημέρωσης β_k^{FR} στην σχέση (4.31) με κάποια άλλη παράμετρο ενημέρωσης, η ιδιότητα $g_k^T d_k = -\|g_k\|^2$ εξακολουθεί να ισχύει. Στη βιβλιογραφία [27, 33, 39, 80, 82, 84, 140, 141] έχουν προταθεί αρκετές τροποποιήσεις των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων, οι οποίες βασίζονται στο σχήμα (4.31) των Zhang et al.

Η BFGS Ενημέρωση Ελάχιστης Μνήμης

Σε αυτό το κεφάλαιο μελετάμε τη *BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης* (memoryless BFGS update), εξαιτίας της σπουδαιότητας που έχει η BFGS ενημέρωση στις μεθόδους βελτιστοποίησης [102]. Με τον όρο *ελάχιστη μνήμη* εννοούμε ότι για την ενημέρωση του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα κάνουμε χρήση μόνο ενός ($m = 1$) διανυσματικού ζεύγους (s_k, y_k) , ενώ σε κάθε επανάληψη, ο αρχικός μας πίνακας θεωρούμε ότι είναι ένα πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα, κλιμακούμενος με τη φασματική παράμετρο των Barzilai και Borwein [14], γνωστή και ως BB spectral parameter. Βασίζόμενοι στη θεμελιώδη ιδιότητα της κλάσης αυτής των πινάκων (ελάχιστης μνήμης) είμαστε σε θέση να παράγουμε κλειστό τύπο για το χαρακτηριστικό τους πολυώνυμο. Αμεση συνέπεια αυτού είναι ότι μπορούμε να βρούμε αναλυτικά τις ιδιοτιμές τους, καθώς και τον αντίστροφο του πίνακα $(B + \mu I)$, όπου $\mu \in \mathbb{R}$, που απαιτείται για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης σε μεθόδους βελτιστοποίησης. Επίσης, παράγουμε κλειστούς τύπους εύρεσης των ιδιοδιανυσμάτων που αντιστοιχούν σε διακριτές ιδιοτιμές. Αυτό επιτυγχάνεται είτε μέσω απλών αλγεβρικών πράξεων είτε μέσω της εφαρμογής της μεθόδου της αντίστροφης δύναμης, στον αντίστροφο του πίνακα $(B + \mu I)$. Η προτεινόμενη μέθοδος αποφεύγει πλήρως την παραγοντοποίηση πινάκων, ενώ βασίζεται σε αθροίσματα διανυσμάτων και εσωτερικών γινομένων.

5.1 Εισαγωγή

Η BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης βασίζεται στην BFGS ενημέρωση περιορισμένης μνήμης [100], η οποία αποτελεί τη διασημότερη και επικρατέστερη Quasi-Newton ενημέρωση. Η BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης, η οποία συμβολίζεται με $B_{k+1}^{(1)}$, ορίζεται από

$$B_{k+1}^{(1)} = \frac{1}{\theta_{k+1}} I - \frac{s_k s_k^T}{\theta_{k+1} s_k^T s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} \quad (5.1)$$

όπου $B_{k+1}^{(0)} = \theta_{k+1} I$, με $\theta_{k+1} \in \mathbb{R}^*$. Προφανώς, οι ενημερώσεις χρησιμοποιούν πληροφορία από την πιο πρόσφατη επανάληψη, δηλαδή μία ενημέρωση εκτελείται στον $B_{k+1}^{(0)}$, χρησιμοποιώντας το διανυσματικό ζεύγος (s_k, y_k) .

Αναφορικά με την παράμετρο θ_{k+1} , η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη παράμετρος που συναντάται στη διεθνή βιβλιογραφία [31, 102, 124] είναι η

$$\theta_{k+1} = \frac{y_k^T y_k}{s_k^T y_k}.$$

Τα τελευταία χρόνια όμως, κυρίως στην BFGS ενημέρωση, έχει αρχίσει να χρησιμοποιείται η *φασματική παράμετρος* (spectral parameter) των Barzilai και Borwein [14]

$$\theta_{k+1} = \frac{s_k^T y_k}{s_k^T s_k}, \quad (5.2)$$

Όπως αναφέραμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η φασματική παράμετρος των Barzilai και Borwein η οποία ελαχιστοποιεί την ποσότητα $\|\theta s_k - y_k\|$ παρέχοντας μία προσέγγιση δύο σημείων στην εξίσωση της τέμνουσας (3.15). Ουσιαστικά, η παράμετρος αυτή είναι η ποσότητα Rayleigh

$$\frac{s_k^T \left[\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + \theta s_k) d\theta \right] s_k}{s_k^T s_k},$$

η οποία παίρνει τιμές ανάμεσα στη μικρότερη και στη μεγαλύτερη ιδιοτιμή του μέσου Εσσιανού πίνακα $\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + \theta s_k) d\theta$.

Σκοπός μας είναι να μελετήσουμε τα χαρακτηριστικά μεγέθη της BFGS ενημέρωσης ελάχιστης μνήμης, έτσι ώστε να μπορέσουμε να λύσουμε μεγάλης κλίμακας προβλήματα βελτιστοποίησης, με μικρό υπολογιστικό κόστος. Για να μπορέσουμε να αποφύγουμε το μεγάλο υπολογιστικό κόστος, θα πρέπει να αποφύγουμε τόσο την παραγοντοποίηση, όσο και την αποθήκευση πινάκων. Γι' αυτό το σκοπό, μελετάμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε διακριτές ιδιοτιμές και αποδεικνύουμε ότι ο ακριβής αριθμός των διακριτών ιδιοτιμών εξαρτάται άμεσα από τη σχέση (γραμμική ανεξαρτησία ή μη) που συνδέει τα διανυσματικά ζεύγη ενημέρωσης (s_k, y_k) .

5.2 Το Χαρακτηριστικό Πολυώνυμο της BFGS Ενημέρωσης Ελάχιστης Μνήμης

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιάσουμε ένα πάρα πολύ σημαντικό λήμμα σύμφωνα με το οποίο μπορούμε να υπολογίσουμε αναλυτικά το χαρακτηριστικό πολυώνυμο και κατ' επέκταση τις ιδιοτιμές της BFGS ενημέρωσης ελάχιστης μνήμης (5.1) όταν η παράμετρος θ_{k+1} είναι η BB φασματική παραμέτρος (5.2). Η χρήση αυτής της παραμέτρου, έχει ως αποτέλεσμα να απλοποιούνται οι εκφράσεις που αποτελούν το χαρακτηριστικό πολυώνυμο [7, 9]. Επιπλέον, όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα $B_{k+1}^{(1)}$ έχουν το ίδιο πρόσημο [7, 9]. Κατά συνέπεια, η γνώση του προσήμου της παραμέτρου θ_{k+1} , μας εξασφαλίζει αν ο πίνακας $B_{k+1}^{(1)}$ είναι θετικά ορισμένος ή όχι.

Λήμμα 5.1. [7, 9]. Εστω ότι μία ενημέρωση εφαρμόζεται στο συμμετρικό πίνακα $B^{(0)} = (1/\theta)I$, χρησιμοποιώντας το διανυσματικό ζεύγος (s_k, y_k) και τον BFGS τύπο. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του ενημερωμένου πίνακα $B_{k+1}^{(1)}$, είναι το

$$p(\lambda) = \left(\lambda - \frac{1}{\theta_{k+1}} \right)^{n-2} \left(\lambda^2 - \frac{a_k}{\theta_{k+1}} \lambda + \frac{1}{\theta_{k+1}^2} \right), \quad (5.3)$$

όπου $a_k = 1 + \theta_{k+1} \frac{y_k^T y_k}{s_k^T y_k}$. Επιπλέον, αν $a_k > 2$, τότε

$$\lambda_1 < 1/\theta_{k+1} < \lambda_n,$$

όπου οι λ_1 και λ_n είναι η μικρότερη και η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του $B_{k+1}^{(1)}$, αντίστοιχα.

Επίσης, ένα πολύ σημαντικό συμπέρασμα που απορρέει από το Λήμμα 5.1, είναι ότι οι ακραίες ιδιοτιμές του εν λόγω πίνακα, είναι πάντα διακριτές.

5.3 Ο Πίνακας $(B_{k+1} + \mu I)^{-1}$

Αντικείμενο μελέτης της παρούσας ενότητας είναι η εύρεση του αντιστρόφου του πίνακα $(B_{k+1}^{(1)} + \mu I)^{-1}$, όπου $\mu \in \mathbb{R}$ που απαιτείται για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης. Το παρακάτω λήμμα τεκμηριώνει ότι ο αντίστροφος του πίνακα $B_{k+1}^{(1)}$ μπορεί να γραφτεί σε κλειστή μορφή.

Λήμμα 5.2. [7, 9]. Έστω Λ το σύνολο των ιδιοτιμών του $B_{k+1}^{(1)}$ με αντίθετα πρόσημα. Τότε, για κάθε $\mu \in \mathbb{R}/\Lambda$, ο πίνακας $(B_{k+1}^{(1)} + \mu I)$ είναι αντιστρέψιμος και ο αντίστροφός του δίνεται από τη σχέση

$$(B_{k+1}^{(1)} + \mu I)^{-1} = \frac{1}{\gamma} \sum_{i=0}^2 (-1)^i \gamma_i(\mu) (B_{k+1}^{(1)})^i$$

όπου οι ποσότητες

$$\begin{aligned} \gamma &= (1/\theta_{k+1} + \mu)(\mu^2 + a_k \mu / \theta_{k+1} + 1/\theta_{k+1}^2), \\ \gamma_2 &= 1, \\ \gamma_1 &= \mu + (a_k + 1)/\theta_{k+1}, \\ \gamma_0 &= \mu^2 + (a_k + 1)\mu / \theta_{k+1} + (a_k + 1)/\theta_{k+1}^2, \end{aligned}$$

είναι συναρτήσεις του πραγματικού αριθμού μ .

Σύμφωνα με το Λήμμα 5.1, όταν $a_k = 2$, δηλαδή τα διανύσματα s_k και y_k είναι γραμμικώς εξαρτημένα, η μοναδική ιδιοτιμή του πίνακα $B_{k+1}^{(1)}$ είναι η $1/\theta_{k+1}$. Προφανώς, επειδή ο πίνακας $B_{k+1}^{(1)}$ είναι της μορφής $B_{k+1}^{(1)} = (1/\theta_{k+1})I$, ο αντίστροφος του $B_{k+1}^{(1)} + \mu I$ θα είναι ο πίνακας

$$\left(B_{k+1}^{(1)} + \mu I\right)^{-1} = \frac{\theta_{k+1}}{1 + \theta_{k+1}} I.$$

5.4 Τα Ιδιοδιανύσματα των Ακραίων Ιδιοτιμών

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τα ιδιοδιανύσματα των ακραίων ιδιοτιμών της BFGS ενημέρωσης ελάχιστης μνήμης. Επειδή το πλήθος των διακριτών ιδιοτιμών εξαρτάται από την τιμή της παραμέτρου a_k , διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

1η Περίπτωση. Πρώτα θεωρούμε την περίπτωση όπου $a_k = 2$, δηλαδή την περίπτωση όπου τα διανύσματα s_k και y_k είναι συγγραμμικά. Χρησιμοποιώντας την ιδιοανάλυση του πίνακα $B^{(1)}$ έχουμε

$$B^{(1)} = U \Lambda U^{-1},$$

όπου

$$U = I \quad \text{και} \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_1, \dots, \lambda_1).$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη λ_1 είναι το

$$u_1 = e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

2η Περίπτωση. Οσον αφορά τη δεύτερη περίπτωση, όπου $a_k > 2$, από το Λήμμα 5.1 γνωρίζουμε ότι οι ακραίες ιδιοτιμές είναι διακριτές. Οπότε, για να βρούμε τα ιδιοδιανύσματα των ακραίων ιδιοτιμών, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της αντίστροφης δύναμης με το Λήμμα 5.2, καταλήγουμε στο παρακάτω πόρισμα.

Πόρισμα 5.1. Έστω $\hat{\lambda} = -\lambda + \epsilon$, όπου $\epsilon \rightarrow 0$, μία ϵ -διαταραγμένη διακριτή ιδιοτιμή του πίνακα BFGS πίνακα ελάχιστης μνήμης με αντίθετο πρόσημο και έστω το κανονικοποιημένο διάνυσμα $u = (1, 1, \dots, 1)^T$. Τότε το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη ιδιοτιμή $\hat{\lambda}$ είναι το

$$\hat{u}(\hat{\lambda}) = -\gamma_u(\hat{\lambda}) u + \gamma_{us}(\hat{\lambda}) s_k - \gamma_{uy}(\hat{\lambda}) y_k,$$

όπου οι συντελεστές των διανυσμάτων u , s_k και y_k ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \gamma_u(\hat{\lambda}) &= \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1} + \gamma_0(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2\right] / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2\right], \\ \gamma_{us}(\hat{\lambda}) &= \left\{ \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}\right] s_k^T u + \theta_{k+1} y_k^T u \right\} / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 s_k^T s_k\right], \\ \gamma_{uy}(\hat{\lambda}) &= \left\{ \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1} + a_k\right] \theta_{k+1} y_k^T u - s_k^T u \right\} / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 s_k^T y_k\right]. \end{aligned}$$

αντίστοιχα, ενώ οι ποσότητες $\gamma_0(\hat{\lambda})$, $\gamma_1(\hat{\lambda})$ και $\gamma(\hat{\lambda})$ ορίζονται όπως στο Λήμμα 5.2.

Μέρος III

Νέες Μέθοδοι Βελτιστοποίησης Χωρίς Περιορισμούς

Μέθοδος MP^+ -CG για Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς

Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε μία τροποποίηση του αλγορίθμου του Perry για την ελαχιστοποίηση αντικειμενικών συναρτήσεων. Ο προτεινόμενος αλγόριθμος εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και βασίζεται στη MBFGS εξίσωση της τέμνουσας [71, 72]. Επίσης, αποδεικνύουμε την ολική σύγκλιση της προτεινόμενης μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στην εργασία [82].

6.1 Εισαγωγή

Καταρχάς, αξίζει να υπενθυμίζουμε ότι για τις Quasi-Newton μεθόδους, μία προσέγγιση B_k του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f_k$ μίας μη γραμμικής συνάρτησης f ικανοποιεί τη κλασική εξίσωση της τέμνουσας

$$B_k s_{k-1} = y_{k-1}.$$

Οι Li και Fukushima [71, 72] πρότειναν μία τροποποίηση της μεθόδου BFGS, η οποία συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις χρησιμοποιώντας τη συνθήκη Armijo (3.3) ή τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5). Η μέθοδός τους βασίζεται στην παρακάτω εξίσωση της τέμνουσας.

$$B_k s_{k-1} = z_{k-1}, \tag{6.1}$$

όπου

$$\begin{cases} z_{k-1} &= y_{k-1} + h_{k-1} \|g_{k-1}\|^r s_{k-1}, \\ h_{k-1} &= t + \max \left\{ -\frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2}, 0 \right\} \|g_{k-1}\|^{-r}, \end{cases} \tag{6.2}$$

και $t > 0$.

Χρησιμοποιώντας τη παραπάνω εξίσωση της τέμνουσας (6.1), προτείνουμε την παρακάτω παραλλαγή της παραμέτρου ενημέρωσης του Perry (4.10), ως εξής

$$\beta_k^{MP} = \frac{g_k^T (z_{k-1} - s_{k-1})}{z_{k-1}^T d_{k-1}}. \tag{6.3}$$

όπου το z_{k-1} υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη σχέση (6.2). Υπενθυμίζουμε ότι η MBFGS

εξίσωση της τέμνουσας (6.1) εγγυάται ότι η ποσότητα $z_{k-1}^T d_{k-1}$ στη σχέση (6.3) είναι πάντα θετική, το οποίο συνεπάγεται ότι η παράμετρος ενημέρωσης (6.3) είναι καλά ορισμένη. Επιπλέον, για την εξασφάλιση της δημιουργίας κατευθύνσεων μείωσης, υιοθετούμε την ιδέα της τροποποιημένης μεθόδου FR [142], την οποία παρουσιάσαμε αναλυτικά στην Ενότητα 4.7.2. Έτσι η κατεύθυνση αναζήτησης υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την παρακάτω σχέση

$$d_k = - \left(1 + \beta_k^{\text{MP}} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|} \right) g_k + \beta_k^{\text{MP}} d_{k-1}. \quad (6.4)$$

Πολύ εύκολα μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η ιδιότητα

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2, \quad (6.5)$$

ισχύει ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης.

Επίσης, για την εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις, χρησιμοποιούμε την ιδέα των Gilbert και Nocedal [50] και περιορίζουμε την παράμετρο ενημέρωσης β_k^{MP} σε μη αρνητικές τιμές, δηλαδή

$$\beta_k^{\text{MP}+} = \max \left\{ \frac{g_k^T (z_{k-1} - s_{k-1})}{z_{k-1}^T d_{k-1}}, 0 \right\}. \quad (6.6)$$

6.2 Ο Αλγόριθμος MP^+ -CG

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον προτεινόμενο αλγόριθμο Modified Perry Conjugate Gradient Algorithm (MP-CG).

Αλγόριθμος 6.1 Αλγόριθμος MP-CG

Βήμα 1: Δοθέντων x_0 , $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, k_{MAX} και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την συνάρτησης τιμή f_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε τερμάτισε.

Βήμα 4: Υπολόγισε την κατεύθυνση αναζήτησης d_k ,

$$d_k = - \left(1 + \beta_k^{\text{MP}} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|} \right) g_k + \beta_k^{\text{MP}} d_{k-1}.$$

Βήμα 5: Βρες ένα μήκος βήματος α_k , το οποίο να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe,

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (6.7)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k. \quad (6.8)$$

Βήμα 6: Υπολόγισε το νέο σημείο

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

και θέσε $k = k + 1$.

Βήμα 7: Αν $k > k_{\text{MAX}}$ τότε επέστρεψε "Η μέθοδος απέτυχε" αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

Σημείωση: Στην περίπτωση όπου στον Αλγόριθμο 6.1 η κατεύθυνση αναζήτησης υπολογίζεται αντικαθιστώντας την παράμετρο ενημέρωσης β_k^{MP} με την παράμετρο ενημέρωσης $\beta_k^{\text{MP}+}$, τότε ο αλγόριθμος ονομάζεται Αλγόριθμος MP^+ -CG.

6.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MP-CG για Αυστηρά Κυρτές Συναρτήσεις

Σε αυτήν την ενότητα, θα παρουσιάσουμε την απόδειξη του Αλγορίθμου MP-CG για αυστηρά κυρτές συναρτήσεις.

Καταρχάς, εφόσον στον Αλγόριθμο MP-CG η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (6.7) και (6.8), μπορούμε πολύ εύκολα να αποκομίσουμε ότι $s_{k-1}^T y_{k-1} > 0$ για κάθε $k > 0$, γι' αυτό η σχέση (6.2) ανάγεται στη

$$z_{k-1} = y_{k-1} + t \|g_{k-1}\|^r s_{k-1}. \quad (6.9)$$

Για το σκοπό αυτό θα χρειαστούμε τα παρακάτω λήμματα.

Λήμμα 6.1. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν και η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MP-CG, τότε ισχύει ότι

$$\|z_{k-1}\| \leq (L + t\gamma^r) \|s_{k-1}\|. \quad (6.10)$$

Απόδειξη. Συνδυάζοντας την Υπόθεση 3.2 και τις σχέσεις (3.9) και (6.9), μπορούμε πολύ εύκολα να αποκομίσουμε

$$|z_{k-1}| \leq |y_{k-1}| + t \|g_{k-1}\|^r \|s_{k-1}\| \leq (L + t\gamma^r) \|s_{k-1}\|.$$

Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. □

Το παρακάτω λήμμα είναι ένα γενικό αποτέλεσμα των μεθόδων συζυγών κλίσεων, οι οποίες έχουν υλοποιηθεί με τις συνθήκες Wolfe (6.7) και (6.8) και χρησιμοποιείται ευρέως στη βιβλιογραφία για την απόδειξη της σύγκλισης των μεθόδων συζυγών κλίσεων [31, 60, 102].

Λήμμα 6.2. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν και οι ακολουθίες $\{g_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MP-CG, τότε η συνθήκη του Zoutendijk

$$\sum_{k \geq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < +\infty, \quad (6.11)$$

ισχύει.

Πολύ εύκολα, αντικαθιστώντας τη σχέση (6.5) στη συνθήκη του Zoutendijk (6.11), έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < +\infty. \quad (6.12)$$

Η παραπάνω ανισότητα είναι πάρα πολύ σημαντική για την απόδειξη της σύγκλισης του Αλγορίθμου MP-CG. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MP-CG για αυστηρά κυρτές συναρτήσεις.

Θεώρημα 6.1. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν και η συνάρτηση f είναι αυστηρά κυρτή, δηλαδή, υπάρχει μία σταθερά $\gamma > 0$, τέτοια ώστε

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T(x - y) \geq \gamma \|x - y\|^2, \quad \forall x, y \in \mathcal{L}. \quad (6.13)$$

Αν η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MP-CG, τότε είτε $g_k = 0$ για κάποιο k είτε

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

Απόδειξη. Συνδυάζοντας την υπόθεση της κυρτότητας (6.13) με τη σχέση (6.9), έχουμε

$$z_{k-1}^T d_{k-1} = y_{k-1}^T d_{k-1} + t \|g_{k-1}\|^r s_{k-1}^T d_{k-1} \geq \gamma \alpha_{k-1} \|d_{k-1}\|^2.$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω ανισότητα με τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2 και τη σχέση (6.10)

$$|\beta_k^{\text{MP}}| = \left| \frac{g_k^T (z_{k-1} - s_{k-1})}{z_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \leq \frac{\|g_k\| (\|z_{k-1}\| + \|s_{k-1}\|)}{|z_{k-1}^T d_{k-1}|} \leq \frac{L + t\gamma^r + 1}{\gamma} \frac{\|g_k\|}{\|d_{k-1}\|}.$$

Επομένως, συνδυάζοντας το παραπάνω άνω φράγμα της ποσότητας $|\beta_k^{\text{MP}}|$ με τον ορισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης (6.4), έχουμε

$$\begin{aligned} \|d_k\| &\leq \|g_k\| + |\beta_k^{\text{MP}}| \frac{\|d_{k-1}\| \|g_k\|}{\|g_k\|^2} \|g_k\| + |\beta_k^{\text{MP}}| \|d_{k-1}\| \\ &= \|g_k\| + 2|\beta_k^{\text{MP}}| \|d_{k-1}\| \\ &\leq \left(1 + 2 \frac{L + t\gamma^r + 1}{\gamma} \right) \|g_k\|. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω ανισότητα στη σχέση (6.12), έχουμε ότι $\sum_{k \geq 0} \|g_k\|^2 < \infty$, το οποίο ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

6.4 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MP^+ -CG για μη Κυρτές Συναρτήσεις

Σε αυτήν την ενότητα, θα παρουσιάσουμε την απόδειξη του Αλγορίθμου MP^+ -CG για μη κυρτές συναρτήσεις.

Καταρχάς, θα παρουσιάσουμε ένα πολύ σημαντικό λήμμα σύμφωνα με το οποίο η τιμή της παραμέτρου β_k^{MP} θα είναι μικρή όταν το βήμα s_{k-1} θα είναι μικρό. Αυτή η ιδιότητα είναι παρόμοια με την Ιδιότητα(*) των Gilbert και Nocedal [50] και είναι εξαιρετικά σημαντική για την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου.

Λήμμα 6.3. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MP -CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0, \quad (6.14)$$

τότε υπάρχουν σταθερές $b > 1$ και $\lambda > 0$ τέτοιες ώστε

$$|\beta_k^{MP}| \leq b \quad (6.15)$$

και

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \Rightarrow |\beta_k^{MP}| \leq \frac{1}{b}. \quad (6.16)$$

Απόδειξη. Από τις εξισώσεις (3.9), (6.10) και (6.14) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} |\beta_k^{MP}| &= \left| \frac{g_k^T (z_{k-1} - s_{k-1})}{z_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \\ &\leq \frac{\|g_k\| (\|z_{k-1}\| + \|s_{k-1}\|)}{|z_{k-1}^T d_{k-1}|} \\ &\leq \frac{\gamma(L + t\gamma^r + 1)}{(1 - \sigma_2)\mu^2} \|s_{k-1}\| \triangleq D \|s_{k-1}\|. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Ορίζοντας $b := \max\{2, 2DB\}$ και $\lambda := 1/Db$, έχουμε οι σχέσεις (6.15) και (6.16) ισχύουν. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

Από τον ορισμό της παραμέτρου ενημέρωσης β_k^{MP+} στη σχέση (6.6), μπορούμε πολύ εύκολα να αποκομίσουμε ότι $|\beta_k^{MP+}| \leq |\beta_k^{MP}|$ για κάθε $k > 0$. Οπότε, μπορούμε να πολύ εύκολα να εξασφαλίσουμε το ίδιο αποτέλεσμα για τον Αλγόριθμο MP^+ -CG όπως αυτό του Λήμματος 6.3.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε ένα λήμμα σύμφωνα με το οποίο οι κατευθύνσεις μείωσης που παράγονται από τον Αλγόριθμο MP^+ -CG αλλάζουν αργά, ασυμπτωτικά

Λήμμα 6.4. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο $\text{MP}^+\text{-CG}$ και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε να ισχύει η σχέση (6.14), τότε $d_k \neq 0$ και

$$\sum_{k>0} \|w_k - w_{k-1}\|^2 < \infty,$$

όπου $w_k = \frac{d_k}{\|d_k\|}$.

Απόδειξη. Καταρχάς, σημειώνουμε ότι $d_k \neq 0$, γιατί διαφορετικά από τη σχέση (6.5) θα είχαμε ότι $g_k = 0$. Γι' αυτό το λόγο η w_k είναι καλά ορισμένη. Στη συνέχεια ορίζουμε

$$r_k := \frac{v_k}{\|d_k\|} \quad \text{και} \quad \theta_k := \beta_k^{\text{MP}+} \frac{\|d_{k-1}\|}{\|d_k\|}, \quad (6.18)$$

όπου

$$v_k = - \left(1 + \beta_k^{\text{MP}+} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right) g_k. \quad (6.19)$$

Στη συνέχεια, από τον ορισμό της κατεύθυνσης μείωσης (6.4), έχουμε

$$w_k = r_k + \theta_k w_{k-1}.$$

Χρησιμοποιώντας αυτή τη σχέση με την ταυτότητα $\|w_k\| = \|w_{k-1}\| = 1$, έχουμε

$$\|r_k\| = \|w_k - \theta_k w_{k-1}\| = \|w_{k-1} - \theta_k w_k\|.$$

Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την συνθήκη $\theta_k \geq 0$ και την τριγωνική ανισότητα, έχουμε

$$\begin{aligned} \|w_k - w_{k-1}\| &\leq \|(1 + \theta_k)w_k - (1 + \theta_k)w_{k-1}\| \\ &\leq \|w_k - \theta_k w_{k-1}\| + \|w_{k-1} - \theta_k w_k\| \\ &= 2\|r_k\|. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε ένα άνω φράγμα για την ποσότητα $\|v_k\|$. Από τη συνθήκη Wolfe (6.8), έχουμε

$$g_k^T d_{k-1} \geq \sigma_2 g_{k-1}^T d_{k-1} \geq -\sigma_2 z_{k-1}^T d_{k-1} + \sigma_2 g_k^T d_{k-1}. \quad (6.21)$$

Επίσης, παρατηρούμε ότι

$$g_k^T d_{k-1} = y_{k-1}^T d_{k-1} + g_{k-1}^T d_{k-1} \leq y_{k-1}^T d_{k-1} \leq z_{k-1}^T d_{k-1}. \quad (6.22)$$

Αναδιατάσσοντας την ανισότητα (6.21), αποκομίζουμε ότι $g_k^T d_{k-1} \geq -(\sigma_2/1 - \sigma_2)z_{k-1}^T d_{k-1}$, την οποία συνδυάζοντας την με τη σχέση (6.22), έχουμε

$$\left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{z_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \leq \max \left\{ \frac{\sigma_2}{(1 - \sigma_2)}, 1 \right\}. \quad (6.23)$$

Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της v_k στην εξίσωση (6.19) μαζί με τις σχέσεις (3.8), (3.9), (6.10) και (6.23) αποκομίζουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $D > 0$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned} \|v_k\| &= \left\| \left(1 + \beta_k^{\text{MP}^+} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right) g_k \right\| \\ &\leq \left(1 + \left| \frac{g_k^T (z_{k-1} - s_{k-1})}{z_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right| \right) \|g_k\| \\ &\leq \|g_k\| + (\|z_{k-1}\| + \|s_{k-1}\|) \left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{z_{k-1}^T d_{k-1}} \right| \\ &\leq \gamma + (L + t\gamma^r + 1)B \max \left\{ \frac{\sigma_2}{(1 - \sigma_2)}, 1 \right\} \triangleq D. \end{aligned}$$

Συνεπώς, συνδυάζοντας την παραπάνω ανισότητα με τη σχέση (6.12), έχουμε

$$\sum_{k \geq 1} \|r_k\|^2 \leq \sum_{k \geq 1} \frac{\|v_k\|^2}{\|d_k\|^2} \leq \sum_{k \geq 1} \frac{\|v_k\|^2}{\|g_k\|^4} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} \leq \frac{D^2}{\mu^4} \sum_{k \geq 1} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < +\infty,$$

η οποία μαζί με τη σχέση (6.20) ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

Χρησιμοποιώντας τα Λήμματα (6.3) και (6.4) θα παρουσιάσουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MP^+ -CG για μη κυρτές συναρτήσεις.

Θεώρημα 6.2. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MP^+ -CG τότε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

Απόδειξη. (Με εις άτοπο επαγωγή). Υποθέτουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0.$$

Η απόδειξη χωρίζεται σε δύο βήματα:

Βήμα 1: Υπολογισμός φράγματος για το βήμα s_k . Έστω Δ ένας θετικός ακέραιος τέτοιος ώστε

$$\Delta \geq 4BD,$$

όπου τα B και D ορίζονται στις (3.8) και (6.17), αντίστοιχα. Τότε για κάθε $l > k \geq k_0$ με $l - k \leq \Delta$ και ακολουθώντας την ίδια απόδειξη όπως η περίπτωση II του Θεωρήματος 3.2 στην εργασία [58], έχουμε

$$\sum_{j=k}^{l-1} \|s_j\| < 2B.$$

Βήμα 2: Υπολογισμός φράγματος για την κατεύθυνση καθόδου d_l . Από τον ορισμό της κατεύθυνσης μείωσης (6.4) έχουμε ότι

$$d_l = -g_l + \beta_k^{\text{MP}+} \left(I - \frac{g_l g_l^T}{\|g_l\|^2} \right) d_{l-1}. \quad (6.24)$$

Εφόσον η g_l είναι ορθογώνια στο διάνυσμα $\left(I - \frac{g_l g_l^T}{\|g_l\|^2} \right) d_{l-1}$ και ο πίνακας $I - \frac{g_l g_l^T}{\|g_l\|^2}$ είναι ένας πίνακας προβολής, συνδυάζοντας την Υπόθεση 3.1 με τις σχέσεις (6.17) και (6.24), έχουμε

$$\|d_l\|^2 \leq \|g_l\|^2 + |\beta_k^{\text{MP}+}|^2 \|d_{l-1}\|^2 \leq \gamma^2 + C^2 \|s_{l-1}\|^2 \|d_{l-1}\|^2.$$

Η υπόλοιπη απόδειξη είναι ακριβώς ίδια με αυτή της περίπτωσης III του Θεωρήματος 3.2 στην εργασία [58], γι' αυτό και την παραλείπουμε. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

6.5 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Σε αυτήν την ενότητα αποτιμούμε αριθμητικά την απόδοση του Αλγορίθμου $\text{MP}^+ \text{-CG}$, σε προβλήματα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, με αυτή της μεθόδου CG-DESCENT [58] και της μεθόδου PR^+ [50], οι οποίες αποτελούν τις διασημότερες μεθόδους συζυγών κλίσεων που έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία.

Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής Pentium 2.66GHz, Quad-Core processor, 4GB RAM με λειτουργικό σύστημα Linux και η υλοποίηση των παραπάνω μεθόδων έγινε σε Fortran χρησιμοποιώντας τον compiler ifort (με τις επιλογές -O2 -double-size 128). Ο κώδικας της μεθόδου CG-DESCENT βρίσκεται στην ιστοσελίδα του Hager¹ ενώ ο κώδικας της μεθόδου PR^+ βρίσκεται στην ιστοσελίδα του Nocedal². Ως κριτήριο τερματισμού τέθηκε το $\|g_k\|_\infty \leq 10^{-6}$ και για τον Αλγόριθμο $\text{MP}^+ \text{-CG}$, οι τιμές των παραμέτρων ορίστηκαν ως $t = 10^{-4}$ και $r = 1$, αν $\|g_k\| \geq 1$, διαφορετικά $r = 3$ [146].

Τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς στα οποία αξιολογήθηκαν οι μέθοδοι προέρχονται από τη συλλογή CUTEr, η οποία έχει προταθεί από τους Gould et al. [56] και έχει καθιερωθεί στη διεθνή βιβλιογραφία ως την κατεξοχήν συλλογή προβλημάτων αξιολόγησης αλγορίθμων βελτιστοποίησης. Πιο συγκεκριμένα, πρόκειται για μη γραμμικά προβλήματα χωρίς περιορισμούς, τα οποία συλλέχθηκαν μέσω του shell script SELECT της CUTEr. Έχουν συνεχείς δευτέρους παραγώγους και είναι κάτω φραγμένα. Συνολικά,

¹<http://www.math.ufl.edu/~hager/papers/CG>

²<http://www.ece.northwestern.edu/~nocedal/software.html>

το επιλεγόμενο σύνολο αποτελείται από εκατόν έντεκα (111) συναρτήσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στον Πίνακα 6.1 μαζί με τις διαστάσεις τους. Επίσης, για όλα τις συναρτήσεις τα αρχικά σημεία, παρέχονται αυτόματα από τη βιβλιοθήκη CUTEr, μέσω του εργαλείου αποκωδικοποίησης Sif Decode.

1	ARGLINA	500	29	DIXMAANC	6000	57	FLETCHCR	1000	85	PENALTY1	10000
2	ARGLINB	500	30	DIXMAAND	6000	58	FMINSRF2	121	86	PENALTY2	200
3	ARGLINC	500	31	DIXMAANE	6000	59	FMINSRF2	1024	87	POWELLSG	5000
4	ARWHEAD	1000	32	DIXMAANF	6000	60	FMINSURF	1024	88	POWELLSG	10000
5	ARWHEAD	10000	33	DIXMAANG	6000	61	FMINSURF	5625	89	POWER	1000
6	BDQRTIC	5000	34	DIXMAANH	6000	62	FREUROTH	1000	90	POWER	5000
7	BDQRTIC	1000	35	DIXMAANI	6000	63	FREUROTH	5000	91	QUARTC	5000
8	BROWNAL	400	36	DIXMAANJ	6000	64	GENHUMPS	500	92	QUARTC	10000
9	BROYDN7D	2000	37	DIXMAANK	6000	65	GENHUMPS	1000	93	SCHMVETT	10000
10	BRYBND	5000	38	DIXMAANL	6000	66	GENROSE	100	94	SINQUAD	500
11	BRYBND	1000	39	DIXON3DQ	500	67	GENROSE	500	95	SPARSINE	200
12	CHAINWOO	1000	40	DIXON3DQ	1000	68	HILBERTA	200	96	SPARSINE	1000
13	CHNROSNB	50	41	DQDRTIC	1000	69	HILBERTB	200	97	SPARSQUR	10000
14	COSINE	500	42	DQDRTIC	10000	70	HYDC20LS	99	98	SPMSRTLS	1000
15	COSINE	1000	43	EDENSCH	5000	71	LIARWHD	5000	99	SPMSRTLS	4999
16	CRAGGLVY	2000	44	EG2	1000	72	LIARWHD	10000	100	SROSENB	10000
17	CRAGGLVY	5000	45	EIGENALS	420	73	MANCINO	100	101	TESTQUAD	100
18	CURLY10	200	46	EIGENALS	110	74	MOREBV	1000	102	TOINTGOR	50
19	CURLY10	1000	47	EIGENBLS	420	75	MOREBV	10000	103	TOINTGSS	10000
20	CURLY20	200	48	EIGENCLS	462	76	NONCVXU2	100	104	TQUARTIC	5000
21	CURLY20	1000	49	EIGENCLS	90	77	NONCVXU2	1000	105	TQUARTIC	10000
22	CURLY30	200	50	ENGVAL1	10000	78	NONCVXUN	100	106	TRIDIA	5000
23	CURLY30	1000	51	ERRINROS	50	79	NONCVXUN	1000	107	TRIDIA	10000
24	DECONVU	61	52	EXTROSNB	50	80	NONDIA	5000	108	VARDIM	5000
25	DIXMAANA	1500	53	FLETGBV2	500	81	NONDIA	10000	109	VARDIM	10000
26	DIXMAANA	3000	54	FLETGBV2	1000	82	NONDQUAR	1000	110	VAREIGVL	5000
27	DIXMAANB	1500	55	FLETGBV3	500	83	NONDQUAR	5000	111	WOODS	10000
28	DIXMAANB	3000	56	FLETCHCR	5000	84	PENALTY1	5000			

Πίνακας 6.1: Συλλογή προβλημάτων της CUTEr και οι διαστάσεις τους

Στον Πίνακα 6.2 παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων για κάθε πρόβλημα. Επιπλέον, αν ένας αλγόριθμος αποτύχει να συγκλίνει σε κάποιο ελάχιστο με τη δεδομένη ακρίβεια, δηλαδή $\|g_k\|_\infty \leq 10^{-6}$ τότε επισημαίνεται με «Αποτυχία». Στη συνέχεια παραθέτουμε τους συμβολισμούς του Πίνακα 6.2. Συγκεκριμένα, Iter είναι αριθμός των επαναλήψεων, FcEn είναι ο αριθμός των συναρτησιακών υπολογισμών, GradEn είναι ο αριθμός των υπολογισμών των κλίσεων και Time είναι ο υπολογιστικός χρόνος σε δευτερόλεπτα. Επίσης, οι μέθοδοι οι οποίες αξιολογήσαμε συμβολίζονται ως εξής:

- «CG-Descent» συμβολίζει στη μέθοδο CG-DESCENT των Hager και Zhang [58], η οποία υλοποιήθηκε με μία γραμμική αναζήτηση, η οποία χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe με παραμέτρους $\sigma_1 = 0.1$ και $\sigma_2 = 0.9$.
- «PR+» συμβολίζει στη μέθοδο Polak-Ribière των Gilbert και Nocedal [50], η οποία έχει υλοποιηθεί με τη γραμμική αναζήτηση που προτάθηκε στην εργασία [96].
- «MP+» συμβολίζει στον Αλγόριθμο MP^+ -CG, ο οποίος έχει υλοποιηθεί με την ίδια γραμμική αναζήτηση με τη μέθοδο CG-DESCENT.

No.	CG-Descent				PR+				MP+			
	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
1	1	3	2	0.00	1	5	5	0.01	1	3	2	0.00
2		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
3		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
4	12	31	22	0.00		«Αποτυχία»			8	20	15	0.00
5	10	22	15	0.02		«Αποτυχία»			8	17	11	0.02
6	5018	7656	10649	7.95		«Αποτυχία»			208	542	488	0.40
7	738	1453	1281	0.20		«Αποτυχία»			133	295	257	0.03
8	6	15	11	0.02	5	39	39	0.04	7	17	12	0.02
9	628	1247	643	0.45		«Αποτυχία»			602	1192	616	0.46
10	36	74	39	0.05	26	66	66	0.06	37	77	40	0.05
11	51	103	52	0.00	30	73	73	0.02	33	72	39	0.01
12	435	837	495	0.10		«Αποτυχία»			280	553	393	0.07
13	272	545	273	0.00	243	500	500	0.00	232	466	234	0.00
14	12	29	23	0.00	9	26	26	0.00	11	30	23	0.00
15	12	28	24	0.00	9	29	29	0.00	11	31	25	0.00
16	109	193	138	0.07		«Αποτυχία»			105	191	128	0.07
17	112	201	146	0.23		«Αποτυχία»			215	467	354	0.50
18	2164	3713	3194	0.07		«Αποτυχία»			2120	3666	3135	0.07
19	9574	14559	14741	1.53		«Αποτυχία»			9734	14701	15247	1.57
20	1894	3376	2728	0.08		«Αποτυχία»			1895	3357	2869	0.09
21	9630	15189	14805	2.33		«Αποτυχία»			10528	16269	16841	2.63
22	2058	3688	3042	0.13		«Αποτυχία»			1848	3358	2732	0.11
23	9871	15751	15461	3.36		«Αποτυχία»			10785	16961	17466	3.68
24	385	772	389	0.00	322	666	666	0.00	255	512	260	0.00
25	9	19	10	0.00	7	22	22	0.00	7	15	8	0.00
26	9	19	10	0.01	7	20	20	0.01	7	15	8	0.01
27	9	19	10	0.00	7	24	24	0.00	8	17	9	0.00
28	9	19	10	0.00	6	23	23	0.01	8	17	9	0.00
29	10	21	11	0.01	7	23	23	0.02	9	19	10	0.01
30	12	25	13	0.00	8	25	25	0.01	11	23	12	0.01
31	302	605	303	0.23	307	620	620	0.40	311	623	312	0.26
32	229	459	230	0.18	215	437	437	0.27	219	439	220	0.18
33	226	453	227	0.18	206	420	420	0.26	218	437	219	0.18
34	223	447	224	0.20	408	825	825	0.53	217	435	218	0.19
35	2734	5469	2735	2.30	2357	4720	4720	3.03	3816	7633	3817	3.17
36	295	591	296	0.26	275	557	557	0.35	312	625	313	0.26
37	263	527	264	0.24	289	587	587	0.37	276	553	277	0.23
38	244	489	245	0.20	346	702	702	0.45	243	487	244	0.20
39	499	999	500	0.01	499	1003	1003	0.02	999	1999	1001	0.03
40	1000	2001	1002	0.05	1000	2005	2005	0.08	1017	2035	1020	0.06
41	7	15	8	0.00	5	15	15	0.01	12	25	14	0.00
42	7	15	8	0.01	5	15	15	0.02	12	25	14	0.02
43	34	61	43	0.04		«Αποτυχία»			33	63	45	0.04
44	4	9	6	0.00		«Αποτυχία»			4	9	6	0.00
45	1315	2637	1333	0.63	1539	3112	3112	1.22	1341	2688	1357	0.64
46	377	759	398	0.02	419	856	856	0.04	499	1003	517	0.03
47	5198	10421	5225	2.49	4672	9369	9369	3.68	3874	7761	3888	1.81
48	1705	3431	1728	0.97	1609	3230	3230	1.46	1752	3514	1762	0.94
49	356	714	358	0.01	366	743	743	0.02	306	614	308	0.00
50	24	43	32	0.05		«Αποτυχία»			20	36	27	0.04
51	1004	1994	1339	0.00		«Αποτυχία»			1180	2358	1612	0.00
52	4980	10535	5732	0.10	4038	8777	8777	0.12	4123	8755	4788	0.08

(Συνέχεια)

No.	CG-Descent				PR+				MP+			
	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
53	480	961	482	0.05	480	962	962	0.07	480	961	482	0.04
54	1049	2099	1052	0.22	942	1886	1886	0.29	939	1879	942	0.20
55	20241	46468	28592	6.09		«Αποτυχία»			19617	39840	24894	5.53
56	32150	66781	34912	24.81	20051	40134	40134	21.0	20046	40106	20065	14.44
57	6577	13523	6990	0.96	4484	9012	9012	0.97	4677	9371	4700	0.66
58	113	228	115	0.00	123	250	250	0.00	116	236	120	0.00
59	276	558	282	0.04	257	517	517	0.06	252	508	256	0.03
60	236	474	238	0.04	226	455	455	0.06	248	502	254	0.05
61	491	983	492	0.60	471	949	949	0.82	459	930	472	0.48
62	2164	3713	3194	0.07		«Αποτυχία»			75	152	99	0.01
63	107	172	177	0.14		«Αποτυχία»			61	125	86	0.08
64	1806	3672	1891	0.32	1880	4026	4026	0.52	1917	3923	2035	0.34
65	3021	6140	3142	1.07	2491	5205	5205	1.36	2494	5087	2618	0.89
66	299	626	338	0.00	298	626	626	0.00	298	630	345	0.00
67	1199	2439	1249	0.08	1150	2329	2329	0.12	1112	2271	1174	0.08
68	25	51	31	0.06	13	38	38	0.05	44	89	53	0.08
69	5	11	6	0.01	5	13	13	0.02	6	13	7	0.01
70		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
71	21	48	32	0.02	16	46	46	0.03	23	49	32	0.03
72	26	62	43	0.06	15	46	46	0.06	18	42	29	0.04
73	12	25	13	0.15	11	27	27	0.24	10	21	11	0.13
74	425	851	426	0.04	425	851	851	0.08	425	851	426	0.05
75	95	191	97	0.11	100	201	201	0.21	106	213	108	0.17
76	343	639	396	0.00	477	974	974	0.00	490	932	548	0.00
77	1969	3817	2092	0.43		«Αποτυχία»			1950	3792	2060	0.41
78	170	331	183	0.00	193	397	397	0.00	163	323	168	0.00
79		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
80	9	29	22	0.05	5	26	26	0.06	8	18	12	0.02
81	9	27	22	0.12	6	26	26	0.11	7	16	11	0.05
82	3038	6084	3206	0.22	2895	6073	6073	0.32	2981	5970	3111	0.22
83	5013	10053	5122	1.80	10007	20056	20056	5.39	2185	4393	2584	0.87
84	51	103	52	0.01	38	152	152	0.04	44	95	54	0.02
85	53	126	77	0.06	14	81	81	0.05	48	115	71	0.05
86	199	234	365	0.02		«Αποτυχία»			205	240	386	0.01
87	766	1538	873	0.25	148	346	346	0.08	92	204	122	0.02
88	59	120	70	0.05	177	394	394	0.19	84	182	116	0.06
89	116	233	117	0.00	114	236	236	0.00	133	267	136	0.00
90	258	517	259	0.05	252	514	514	0.07	260	521	261	0.06
91	33	67	34	0.01	17	66	66	0.02	45	118	78	0.01
92	35	71	36	0.02	16	69	69	0.02	47	116	75	0.04
93	46	73	70	0.24	45	105	105	0.32	45	73	68	0.22
94	120	256	219	0.02		«Αποτυχία»			27	77	67	0.01
95	450	901	452	0.01	455	913	913	0.02	482	966	485	0.02
96	4642	9285	4643	1.11	4465	8935	8935	1.72	5439	10879	5440	1.28
97	22	45	23	0.05	41	131	131	0.26	35	75	46	0.11
98	142	291	151	0.03	138	281	281	0.05	134	275	143	0.03
99	218	443	227	0.26	212	430	430	0.39	201	409	210	0.25
100	12	26	17	0.00	8	26	26	0.01	10	22	14	0.01
101	288	577	311	0.00	452	972	972	0.00	380	761	391	0.00
102	122	222	152	0.00		«Αποτυχία»			122	221	153	0.00
103	4	9	5	0.01	4	20	20	0.03	4	9	5	0.01
104	28	75	58	0.03	9	32	32	0.01	15	91	82	0.04

(Συνέχεια)

No.	CG-Descent				PR+				MP+			
	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
105	25	59	42	0.03	13	38	38	0.03	21	57	43	0.04
106	782	1565	783	0.24	781	1565	1565	0.36	938	1877	939	0.28
107	1116	2233	1117	0.69	1114	2231	2231	1.02	1333	2667	1334	0.85
108	50	110	62	0.01	«Αποτυχία»				47	102	56	0.02
109	52	116	65	0.05	«Αποτυχία»				52	115	64	0.05
110	119	303	184	0.31	30	80	80	0.10	79	220	145	0.22
111	253	556	319	0.38	232	487	487	0.40	149	342	205	0.24

Πίνακας 6.2: Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+

Για να απεικονίσουμε τόσο την αποτελεσματικότητα, όσο και την ακρίβεια της προτεινόμενης μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε τα *προφίλ απόδοσης* (performance profiles) των Dolan και Morè [38]. Τα προφίλ απόδοσης δημιουργούν τη γραφική παράσταση του ποσοστού των προβλημάτων, τα οποία έλυσε μία δοθείσα μέθοδος, μέσα σε ένα κλάσμα του καλύτερου χρόνου που επιτεύχθηκε από τις μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν. Ο αριστερός άξονας δείχνει την αποδοτικότητα της εκάστοτε μεθόδου, ο δεξιός άξονας του γραφήματος δείχνει τη δυναμικότητα του μεθόδου. Για την κατασκευή των γραφημάτων απόδοσης χρησιμοποιήσαμε τη βιβλιοθήκη Libort [49], η οποία συνίσταται από cell scripts του λειτουργικού συστήματος Linux και υλοποιεί τη μέθοδο των Dolan και Morè, ενώ παράλληλα τα γραφήματα παράγονται μέσω της πλατφόρμας Matlab.

Στις Εικόνες 6.1-6.4 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης ως προς τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών, τον αριθμό των υπολογισμών των κλίσεων, τον αριθμό των επαναλήψεων και ως προς τον υπολογιστικό χρόνο, αντίστοιχα.

Εικόνα 6.1: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών

Εικόνα 6.2: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των υπολογισμών των κλίσεων

Εικόνα 6.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων

Εικόνα 6.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, PR+ και MP+ ως προς τον υπολογιστικό χρόνο

Από τις Εικόνες 6.1-6.4 μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η μέθοδος MP+ επιδεικνύει την μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι η καλύτερη μέθοδος όσον αφορά όλες τις μετρικές απόδοσης. Η PR+ παρουσιάζει τη χειρότερη απόδοση μιας που κατάφερε να λύσει μόνο το 73.8% των προβλημάτων ενώ οι μέθοδοι MP+ και CG-Descent έλυσαν το 96.3% των προβλημάτων. Αξίζει να τονίσουμε ότι η MP+ επιλύει το 51.4% και 55.9% των προβλημάτων με το μικρότερο αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και υπολογισμών κλίσεων, αντίστοιχα ενώ η CG-Descent επιλύει μόνο το 31.5% και 44.1% των προβλημάτων. Επιπλέον, οι Εικόνες 6.3 και 6.4 επιδεικνύουν ότι η μέθοδος MP+ παρουσιάζει την καλύτερη απόδοση όσον αφορά τον αριθμό των επαναλήψεων και τον υπολογιστικό χρόνο μίας που αντιστοιχεί στην ανώτατη καμπύλη.

6.6 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάσαμε μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία βασίζεται στην MBFGS εξίσωση της τέμνουσας, τροποποιώντας τη μέθοδο του Perry. Μία σημαντική ιδιότητα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Επίσης, η μέθοδος συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe.

Με βάση τα αριθμητικά μας αποτελέσματα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η τροποποιημένη μέθοδος έχει πολύ καλή υπολογιστική αποτελεσματικότητα, υπερτερώντας των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων.

Μέθοδος MDL^+ -CG για Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς

Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε μία νέα μέθοδος συζυγών κλίσεων, η οποία αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Dai-Liao και εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Μία πολύ σημαντική ιδιότητα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας, η οποία προτάθηκε από τους Babaie-Kafaki et al. [13]. Επίσης, αποδεικνύουμε την ολική σύγκλιση της προτεινόμενης μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες του Wolfe. Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στην εργασία [80].

7.1 Εισαγωγή

Καταρχάς, αξίζει να υπενθυμίζουμε ότι για τις Quasi-Newton μεθόδους, μία προσέγγιση B_k του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 f_k$ μίας μη γραμμικής συνάρτησης f ικανοποιεί τη κλασική εξίσωση της τέμνουσας

$$B_k s_{k-1} = y_{k-1}. \quad (7.1)$$

Πρόσφατα, οι Babaie-Kafaki et al. [13] πρότειναν μία τροποποίηση της μεθόδου DL, η οποία βασίζεται στην παρακάτω εξίσωση της τέμνουσας

$$B_k s_{k-1} = \tilde{y}_{k-1}^*, \quad \tilde{y}_{k-1}^* = y_{k-1} + \rho_k \frac{\max\{\tilde{\theta}_{k-1}, 0\}}{s_{k-1}^T u} u, \quad (7.2)$$

όπου το $\rho_k \in [0, 1]$ είναι μία παράμετρος, το u είναι ένα διάνυσμα τέτοιο ώστε $s_{k-1}^T u > 0$ και το $\tilde{\theta}_{k-1}$ ορίζεται από

$$\tilde{\theta}_{k-1} = 6(f_{k-1} - f_k) + 3(g_k + g_{k-1})^T s_{k-1}. \quad (7.3)$$

Η παραπάνω εξίσωση της τέμνουσας (7.2) προσεγγίζει την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης f με μεγαλύτερη ακρίβεια από ότι η κλασική εξίσωση της τέμνουσας (7.1) (Θεώρημα 4.3). Χρησιμοποιώντας την παραπάνω τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας (7.2), οι Babaie-Kafaki et al. [13] πρότειναν μία παραλλαγή της μεθόδου DL ως εξής:

$$\tilde{\beta}_k^{\text{DL}} = \frac{g_k^T (\tilde{y}_{k-1}^* - t s_{k-1})}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*}, \quad (7.4)$$

Επίσης, για την εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις υιοθέτησαν την ιδέα των Dai και Liao [30] και τροποποίησαν τη $\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}$, ως εξής

$$\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+} = \max \left\{ \frac{g_k^T \tilde{y}_{k-1}^*}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*}, 0 \right\} - t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*}. \quad (7.5)$$

Παρόλα τα θεωρητικά πλεονεκτήματα της μεθόδου των Babaie-Kafaki et al. [13], η μέθοδος δεν μπορεί να εγγυηθεί τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης. Για την αντιμετώπιση αυτού του μειονεκτήματος, υιοθετούμε την ιδέα της τροποποιημένης μεθόδου FR [142] (Ενότητα 4.7.2) και προτείνουμε μία παραλλαγή αυτής της μεθόδου DL ως εξής:

$$d_k = - \left(1 + \tilde{\beta}_k^{\text{DL}} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|} \right) g_k + \tilde{\beta}_k^{\text{DL}} d_{k-1}. \quad (7.6)$$

Πολύ εύκολα από την παραπάνω σχέση μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η ισχύει η ιδιότητα

$$g_k^T d_k = -\|g_k\|^2. \quad (7.7)$$

7.2 Ο Αλγόριθμος MDL^+ -CG

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον προτεινόμενο αλγόριθμο Modified Dai-Liao Conjugate Gradient Algorithm (MDL-CG).

Αλγόριθμος 7.1 Αλγόριθμος MDL-CG

Βήμα 1: Δοθέντων x_0 , $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, k_{MAX} και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την συνάρτησης τιμή f_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε τερμάτισε.

Βήμα 4: Υπολόγισε την κατεύθυνση αναζήτησης d_k ,

$$d_k = - \left(1 + \tilde{\beta}_k^{\text{DL}} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|} \right) g_k + \tilde{\beta}_k^{\text{DL}} d_{k-1}.$$

Βήμα 5: Βρες ένα μήκος βήματος α_k χρησιμοποιώντας κάποια γραμμική αναζήτηση.

Βήμα 6: Υπολόγισε το νέο σημείο

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.$$

και θέσε $k = k + 1$.

Βήμα 7: Αν $k > k_{\text{MAX}}$ τότε επέστρεψε “Η μέθοδος απέτυχε” αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

Σημείωση: Στην περίπτωση όπου στον Αλγόριθμο 7.1 η κατεύθυνση αναζήτησης υπολογίζεται αντικαθιστώντας την παράμετρο $\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}$ με την παράμετρο $\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+}$, τότε ο αλγόριθμος ονομάζεται Αλγόριθμος MDL^+ -CG.

7.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MDL-CG για Αυστηρά Κυρτές Συναρτήσεις

Σε αυτήν την ενότητα, θα παρουσιάσουμε την απόδειξη του Αλγορίθμου MDL-CG για αυστηρά κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo. Υπενθυμίζουμε ότι αν η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo πρέπει να υπολογιστεί ένα μήκος βήματος $\alpha_k = \max\{\lambda^j, j = 0, 1, 2, \dots\}$ με $\delta, \lambda \in (0, 1)$, τέτοιο ώστε

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \delta \alpha_k g_k^T d_k, \quad (7.8)$$

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε κάποια λήμματα, τα οποία είναι πολύ σημαντικά για την ανάλυση της ολικής σύγκλισης της μεθόδου.

Λήμμα 7.1. [13]. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Τότε για τις ποσότητες $\tilde{y}_{k-1}^*$ και $\tilde{\theta}_{k-1}$, οι οποίες ορίζονται από τις σχέσεις και (7.2) και (7.3), αντίστοιχα, ισχύει ότι

$$|\theta_{k-1}| \leq 3L\|s_{k-1}\|^2 \quad \text{και} \quad \|\tilde{y}_{k-1}^*\| \leq 4L\|s_{k-1}\|.$$

Λήμμα 7.2. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν και η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MDL-CG και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo (7.8) τότε υπάρχει μία θετική σταθερά $c > 0$ τέτοια ώστε

$$\alpha_k \geq c \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2}, \quad (7.9)$$

για κάθε $k \geq 0$

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας τη συνθήκη Armijo (7.8) και τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2, έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} -\delta \alpha_k d_k^T g_k < +\infty.$$

Συνδυάζοντας την παραπάνω σχέση με την (7.7), έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} \alpha_k \|g_k\|^2 = - \sum_{k \geq 0} \alpha_k d_k^T g_k < +\infty. \quad (7.10)$$

Για να αποδείξουμε τη σχέση (7.9), θα θεωρήσουμε τις παρακάτω περιπτώσεις:

Περίπτωση 1η: Αν $\alpha_k = 1$, τότε από τη σχέση (7.7) έχουμε ότι $\|d_k\| \leq \|g_k\|$. Σε αυτή τη περίπτωση η ανισότητα (7.9) ικανοποιείται για $c = 1$.

Περίπτωση 2η: Αν $\alpha_k < 1$, τότε η γραμμική αναζήτηση για $\lambda^{-1}\alpha_k$ δεν ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo, το οποίο συνεπάγεται ότι

$$f(x_k + \lambda^{-1}\alpha_k d_k) - f(x_k) > \delta \lambda^{-1} \alpha_k g_k^T d_k. \quad (7.11)$$

Χρησιμοποιώντας το Θεώρημα Μέσης Τιμής και τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2, έχουμε

$$f(x_k + \lambda^{-1}\alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \lambda^{-1} \alpha_k g_k^T d_k + L \lambda^{-2} \alpha_k^2 \|d_k\|^2.$$

Συνδυάζοντας την παραπάνω ανισότητα με τις σχέσεις (7.7) και (7.11), έχουμε

$$\alpha_k \geq -\frac{(1-\delta)\lambda}{L} \frac{g_k^T d_k}{\|d_k\|^2} = \frac{(1-\delta)\lambda}{L} \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2}.$$

Θέτοντας $c = \min \left\{ 1, \frac{(1-\delta)\lambda}{L} \right\}$, καταλήγουμε στη σχέση (7.9), το οποίο ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

Σε αυτό το σημείο, αξίζει να επισημάνουμε ότι από τις ανισότητες (7.9) και (7.10), μπορούμε πολύ εύκολα να οδηγηθούμε στο παρακάτω λήμμα.

Λήμμα 7.3. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{g_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo (7.8), τότε

$$\sum_{k \geq 0} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < +\infty. \quad (7.12)$$

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MDL-CG για αυστηρά κυρτές συναρτήσεις.

Θεώρημα 7.1. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν και η συνάρτηση f είναι αυστηρά κυρτή, δηλαδή, υπάρχει μία σταθερά $\gamma > 0$, τέτοια ώστε

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x - y) \geq \gamma \|x - y\|^2, \quad \forall x, y \in \mathcal{L}. \quad (7.13)$$

Αν η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τη συνθήκη Armijo (7.8), τότε είτε $g_k = 0$ για κάποιο k είτε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

Απόδειξη. Υποθέτουμε ότι $g_k \neq 0$ για κάθε $k \geq 0$. Συνδυάζοντας την υπόθεση της κυρτότητας (7.13) με τη σχέση (7.2), έχουμε

$$d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^* \geq d_{k-1}^T y_{k-1} \geq \gamma \alpha_{k-1}^{-1} \|s_{k-1}\|^2.$$

Συνδυάζοντας την παραπάνω ανισότητα με το Λήμμα 7.1, έχουμε

$$|\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}| = \left| \frac{g_k^T (\tilde{y}_{k-1}^* - t s_{k-1})}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| \leq \frac{\|g_k\| (\|\tilde{y}_{k-1}^*\| + t \|s_{k-1}\|)}{|d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*|} \leq \frac{4L + t}{\gamma} \frac{\|g_k\|}{\|d_{k-1}\|}.$$

Επομένως, συνδυάζοντας το παραπάνω άνω φράγμα της ποσότητας $|\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}|$ με τον ορισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης (7.6), έχουμε

$$\begin{aligned} \|d_k\| &\leq \|g_k\| + |\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}| \frac{\|d_{k-1}\| \|g_k\|}{\|g_k\|^2} \|g_k\| + |\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}| \|d_{k-1}\| \\ &\leq \|g_k\| + 2|\tilde{\beta}_k^{\text{DL}}| \|d_{k-1}\| \\ &\leq \left(1 + 2\frac{4L + t}{\gamma} \right) \|g_k\|. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την παραπάνω ανισότητα στη σχέση (7.12), έχουμε $\sum_{k \geq 0} \|g_k\|^2 < \infty$. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

7.4 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MDL⁺-CG για μη Κυρτές Συναρτήσεις

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε ότι ο Αλγόριθμος MDL⁺-CG συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (7.14) και (7.15). Υπενθυμίζουμε ότι αν η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe τότε απαιτείται το μήκος βήματος α_k να ικανοποιεί τις παρακάτω σχέσεις:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) - f(x_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (7.14)$$

$$g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 g_k^T d_k, \quad (7.15)$$

με $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$.

Λήμμα 7.4. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0, \quad (7.16)$$

τότε υπάρχουν θετικές σταθερές C_1 και C_2 τέτοιες ώστε

$$|\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+}| \leq C_1 \|s_{k-1}\| \quad (7.17)$$

και

$$|\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+}| \frac{|g_k^T d_{k-1}|}{\|g_k\|^2} \leq C_2 \|s_{k-1}\|. \quad (7.18)$$

Απόδειξη. Από τις σχέσεις (7.2), (7.7) και (7.15), έχουμε

$$d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^* \geq d_{k-1}^T y_{k-1} \geq (\sigma_2 - 1) g_{k-1}^T d_{k-1} = (1 - \sigma_2) \|g_{k-1}\|^2.$$

Χρησιμοποιώντας αυτή τη σχέση με το Λήμμα 7.1 την Υπόθεση 3.2 και τις σχέσεις (3.9) και (7.16), έχουμε

$$\begin{aligned} |\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+}| &\leq \left| \frac{g_k^T \tilde{y}_{k-1}^*}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| + t \left| \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| \\ &\leq \frac{4ML \|s_{k-1}\|}{(1 - \sigma_2) \mu^2} + t \frac{M \|s_{k-1}\|}{(1 - \sigma_2) \mu^2} \\ &= \frac{(4L + t)M}{(1 - \sigma_2) \mu^2} \|s_{k-1}\|. \end{aligned}$$

Θέτοντας $C_1 = \frac{(4L+t)M}{(1-\sigma_2)\mu^2}$ τότε η σχέση (7.17) ικανοποιείται. Επιπλέον, από τη συνθήκη Wolfe (7.15), ισχύει ότι

$$g_k^T d_{k-1} \geq \sigma_2 g_{k-1}^T d_{k-1} \geq -\sigma_2 d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^* + \sigma_2 g_k^T d_{k-1}. \quad (7.19)$$

Επίσης, παρατηρούμε ότι

$$g_k^T d_{k-1} = d_{k-1}^T y_{k-1} + g_{k-1}^T d_{k-1} \leq d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*. \quad (7.20)$$

Αναδιατάσσοντας την ανισότητα (7.19), αποκομίζουμε $g_k^T d_{k-1} \geq -(\sigma_2/1 - \sigma_2) d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*$, την οποία συνδυάζοντας την με τη σχέση (7.20), έχουμε

$$\left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| \leq \max \left\{ \frac{\sigma_2}{(1 - \sigma_2)}, 1 \right\}. \quad (7.21)$$

Συνδυάζοντας την Υπόθεση 3.1 με τις σχέσεις (7.7), (7.15), (7.16) και (7.17) προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} |\tilde{\beta}_k^{\text{DL}+}| \frac{|g_k^T d_{k-1}|}{\|g_k\|^2} &\leq \frac{\|g_k\| (\|\tilde{y}_{k-1}^*\| + t \|s_{k-1}\|)}{|d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*|} \frac{|g_k^T d_{k-1}|}{\|g_k\|^2} \\ &\leq \frac{(4L + t)}{\mu} \max \left\{ \frac{\sigma_2}{(1 - \sigma_2)}, 1 \right\} \|s_{k-1}\|. \end{aligned}$$

Θέτοντας $C_2 = \frac{(4L+t) \max\{\sigma_2/(1-\sigma_2), 1\}}{\mu}$ τότε η σχέση (7.18) ικανοποιείται. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε ένα λήμμα σύμφωνα με το οποίο οι κατευθύνσεις μείωσης που παράγονται από τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG αλλάζουν αργά, ασυμπτωτικά.

Λήμμα 7.5. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MDL^+ -CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε να ισχύει η σχέση (7.16), τότε $d_k \neq 0$ και

$$\sum_{k>0} \|w_k - w_{k-1}\|^2 < \infty,$$

όπου $w_k = \frac{d_k}{\|d_k\|}$.

Απόδειξη. Καταρχάς, σημειώνουμε ότι $d_k \neq 0$, γιατί διαφορετικά από τη σχέση (7.7) θα είχαμε ότι $g_k = 0$. Γι' αυτό το λόγο η w_k είναι καλά ορισμένη. Στη συνέχεια, χωρίζουμε τη παράμετρο ενημέρωσης $\tilde{\beta}_k^*$ σε δύο μέρη, δηλαδή

$$\tilde{\beta}_k^{\text{DL}^+} = \tilde{\beta}_k^{(1)} + \tilde{\beta}_k^{(2)} \quad (7.22)$$

όπου

$$\tilde{\beta}_k^{(1)} = \max \left\{ \frac{g_k^T \tilde{y}_{k-1}^*}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*}, 0 \right\} \quad \text{και} \quad \tilde{\beta}_k^{(2)} = -t \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*}.$$

Επιπλέον, ορίζουμε

$$r_k := \frac{v_k}{\|d_k\|} \quad \text{και} \quad \theta_k := \beta_k^{(1)} \frac{\|d_{k-1}\|}{\|d_k\|}, \quad (7.23)$$

όπου

$$v_k = - \left(1 + \tilde{\beta}_k^{\text{DL}^+} \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right) g_k + \tilde{\beta}_k^{(2)} d_{k-1}. \quad (7.24)$$

Στη συνέχεια, από τον ορισμό της κατεύθυνσης μείωσης (7.6), έχουμε

$$w_k = r_k + \theta_k w_{k-1}.$$

Χρησιμοποιώντας αυτή τη σχέση με την ταυτότητα $\|w_k\| = \|w_{k-1}\| = 1$, έχουμε

$$\|r_k\| = \|w_k - \theta_k w_{k-1}\| = \|w_{k-1} - \theta_k w_k\|.$$

Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την συνθήκη $\theta_k \geq 0$ και την τριγωνική ανισότητα, έχουμε

$$\begin{aligned} \|w_k - w_{k-1}\| &\leq \|(1 + \theta_k)w_k - (1 + \theta_k)w_{k-1}\| \\ &\leq \|w_k - \theta_k w_{k-1}\| + \|w_{k-1} - \theta_k w_k\| \\ &= 2\|r_k\|. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε ένα άνω φράγμα για την ποσότητα $\|v_k\|$. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της v_k στην εξίσωση (7.24) μαζί με τις σχέσεις (3.9), (7.17), (7.18) και (7.21)

αποκομίζουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $D > 0$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned}
\|v_k\| &= \left\| - \left(1 + \tilde{\beta}_k^* \frac{g_k^T d_{k-1}}{\|g_k\|^2} \right) g_k + \tilde{\beta}_k^{(2)} d_{k-1} \right\| \\
&\leq \left(1 + |\tilde{\beta}_k^*| \frac{|g_k^T d_{k-1}|}{\|g_k\|^2} \right) \|g_k\| + t \left| \frac{g_k^T s_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| \|d_{k-1}\| \\
&\leq \left(1 + |\tilde{\beta}_k^*| \frac{|g_k^T d_{k-1}|}{\|g_k\|^2} \right) \|g_k\| + t \left| \frac{g_k^T d_{k-1}}{d_{k-1}^T \tilde{y}_{k-1}^*} \right| \|s_{k-1}\| \\
&\leq (1 + C_2)M + t \max \left\{ \frac{\sigma_2}{(1 - \sigma_2)}, 1 \right\} B \triangleq D.
\end{aligned}$$

Συνεπώς, συνδυάζοντας την παραπάνω ανισότητα με το Λήμμα 7.3, έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} \|r_k\|^2 = \sum_{k \geq 0} \frac{\|v_k\|^2}{\|d_k\|^2} = \sum_{k \geq 0} \frac{\|v_k\|^2}{\|g_k\|^4} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} \leq \frac{D^2}{\mu^4} \sum_{k \geq 0} \frac{\|g_k\|^4}{\|d_k\|^2} < +\infty.$$

η οποία μαζί με τη σχέση (7.25) ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

Στη συνέχεια του Κεφαλαίου συμβολίζουμε με Z^+ , το σύνολο των θετικών ακεραίων. Για $\lambda > 0$ και ενός θετικού ακεραίου Δ , ορίζουμε το σύνολο

$$\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda := \{i \in Z^+ \mid k \leq i \leq k + \Delta - 1, \|s_{i-1}\| > \lambda\}.$$

Θεωρούμε ότι ο αριθμός των στοιχείων του $\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda$ συμβολίζεται με $|\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda|$.

Ακολουθώντας, παρουσιάζουμε ένα λήμμα για το βήμα s_{k-1} , το οποίο δηλώνει ότι αν οι κλίσεις είναι φραγμένες μακριά από το μηδέν και αν το Λήμμα 7.4 ισχύει τότε ένα συγκεκριμένο κλάσμα βημάτων δεν μπορεί να είναι πολύ μικρό. Το παρακάτω λήμμα είναι ισοδύναμο με το Λήμμα 3.5 στην εργασία [30] και με το Λήμμα 4.2 στην εργασία [50].

Λήμμα 7.6. Έστω ότι όλες οι υποθέσεις του Λήμματος 7.4 ισχύουν. Τότε υπάρχει μία σταθερά $\lambda > 0$ τέτοια ώστε για κάθε $\Delta \in Z^+$ και κάθε δείκτη k_0 υπάρχει ένας δείκτης $k \geq k_0$ τέτοιος ώστε

$$|\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda| > \frac{\Delta}{2}.$$

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MDL⁺-CG για μη κυρτές συναρτήσεις του οποίου η απόδειξη είναι ακριβώς ίδια με αυτή του Θεωρήματος 3.6 στην εργασία [30] και του Θεωρήματος 4.3 στην εργασία [50].

Θεώρημα 7.2. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι η ακολουθία $\{x_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG τότε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

7.5 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Σε αυτήν την ενότητα αποτιμούμε αριθμητικά την απόδοση του Αλγορίθμου MDL⁺-CG, σε προβλήματα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, με αυτή της μεθόδου CG-DESCENT [58] της οποίας ο κώδικας αποκτήθηκε από την ιστοσελίδα του Hager¹. Οι μέθοδοι αξιολογήθηκαν σε 73 προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, τα οποία μπορούν να βρεθούν στη ιστοσελίδα του Andrei² και παρουσιάζονται στον Πίνακα 7.1.

1 Extended Freudenstein Roth	26 Extended Cliff	50 Tridiagonal Perturbed Quadratic
2 Extended Trigonometric	27 Quadratic Diagonal Perturbed	51 EDENSCH (CUTE)
3 Extended Rosenbrock	28 Extended Wood	52 VARDIM (CUTE)
4 Extended White & Holst	29 Extended Hiebert	53 STAIRCASE S1
5 Extended Beale	30 Quadratic QF1	54 LIARWHD (CUTE)
6 Extended Penalty	31 Extended Quadratic Penalty QP1	55 Diagonal 6
7 Perturbed Quadratic	32 Extended Quadratic Penalty QP2	56 DIXON3DQ (CUTE)
8 Raydan 1	33 Quadratic QF2	57 DIXMAANF (CUTE)
9 Raydan 2	34 Extended EP1	58 DIXMAANG (CUTE)
10 Diagonal 1	35 Extended Tridiagonal 2	59 DIXMAANH (CUTE)
11 Diagonal 2	36 BDQRTIC (CUTE)	60 DIXMAANI (CUTE)
12 Diagonal 3	37 TRIDIA (CUTE)	61 DIXMAANJ (CUTE)
13 Hager	38 ARWHEAD (CUTE)	62 DIXMAANK (CUTE)
14 Generalized Tridiagonal 1	39 NONDIA (CUTE)	63 DIXMAANL (CUTE)
15 Extended Tridiagonal 1	40 NONDQUAR (CUTE)	64 ENGVAL1 (CUTE)
16 Extended Three Expo Terms	41 DQDRTIC (CUTE)	65 FLETCHCR (CUTE)
17 Generalized Tridiagonal 2	42 EG2 (CUTE)	66 COSINE (CUTE)
18 Diagonal 4	43 DIXMAANA (CUTE)	67 Extended DENSCHNB (CUTE)
19 Diagonal 5	44 DIXMAANB (CUTE)	68 Extended DENSCHNF (CUTE)
20 Extended Himmelblau	45 DIXMAANC (CUTE)	69 SINGUAD (CUTE)
21 Generalized PSC1	46 DIXMAANE (CUTE)	70 BIGGSB1 (CUTE)
22 Extended PSC1	47 Partial Perturbed Quadratic PPQ1	71 Partial Perturbed Quadratic PPQ2
23 Extended Powell	48 Broyden Tridiagonal	72 Scaled Quadratic SQ1
24 Extended Block-Diagonal BD1	49 Almost Perturbed Quadratic	73 Scaled Quadratic SQ2
25 Extended Maratos		

Πίνακας 7.1: Κατάλογος προβλημάτων από τη συλλογή προβλημάτων του Andrei

Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής Pentium 2.66GHz, Quad-Core processor, 4GB RAM με λειτουργικό σύστημα Linux και η υλοποίηση των παραπάνω μεθόδων έγινε Fortran με χρησιμοποιώντας τον compiler ifort (με τις επιλογές -O2 -double-size 128). Ως κριτήριο τερματισμού τέθηκε το $\|g_k\|_\infty \leq 10^{-6}$ και για τον Αλγόριθμο MDL⁺-CG θέσαμε $u = s_{k-1}$ [13].

¹<http://www.math.ufl.edu/~hager/papers/CG>

²<http://camo.ici.ro/neculai/SCALCG/testuo.pdf>

Στη συνέχεια, επικεντρώνουμε το ενδιαφέρον της ανάλυσής μας για την εύρεση της βέλτιστης τιμής της παραμέτρου t . Γι' αυτό το λόγο αξιολογούμε την απόδοση του Αλγορίθμου MDL⁺-CG για τιμές της παραμέτρου t από 0 μέχρι 1 με βήμα 0.005. Αναλυτικά τα αποτελέσματα για κάθε τιμή της παραμέτρου t μπορούν να βρεθούν στην ιστοσελίδα ³.

Εικόνα 7.1: Ποσοστό επιτυχίας του Αλγορίθμου MDL⁺-CG για κάθε τιμή της παραμέτρου t .

Εικόνα 7.2: Πολυγράφημα με τη μέση τιμή των συναρτησιακών υπολογισμών (μπλέ γραμμή) και με τη μέση τιμή των υπολογισμών των κλίσεων (κόκκινη γραμμή).

³www.math.upatras.gr/~livieris/Results/MDL_results.zip

Η Εικόνα 7.1 παρουσιάζει το ποσοστό των προβλημάτων τα οποία επιλύθηκαν επιτυχώς από τον Αλγόριθμο MDL^+ -CG για κάθε τιμή της παραμέτρου t . Η Εικόνα 7.2 παρουσιάζει το πολυγράφημα με τη μέση τιμή των συναρτησιακών υπολογισμών και με τη μέση τιμή των υπολογισμών των κλίσεων. Ο Αλγόριθμος MDL^+ -CG επιδεικνύει τα καλύτερα αποτελέσματα όσον αν αφορά το ποσοστό επιτυχίας για τιμές της παραμέτρου t , οι οποίες ανήκουν στο διάστημα $[0.785, 0.825]$. Επίσης, στην περίπτωση όπου $t = 0.82$ ο Αλγόριθμος MDL^+ -CG παρουσιάζει το μεγαλύτερο ποσοστό επιτυχίας 98.64%, επιλύοντας επιτυχώς 216 από τα 219 προβλήματα.

Εκάθαρα από τις Εικόνες 7.1 και 7.2 συμπαιρνουμε ότι η τιμή της παραμέτρου t έχει μεγαλύτερη επιρροή στο υπολογιστικό κόστος συνεπώς στρέφουμε το ενδιαφέρον μας στη μέλητη της μετρικής του αριθμού των συναρτησιακών υπολογισμών και των υπολογισμών των κλίσεων. Με βάση τα αριθμητικά μας αποτελέσματα πάνω σε αυτή τη συλλογή προβλημάτων υποθέτουμε ότι η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου t βρίσκεται στο διάστημα $[0.02, 0.115]$ όσον αφορά το υπολογιστικό κόστος. Επίσης, αξίζει να τονίσουμε ότι αν $t = 0.07$ ο Αλγόριθμος MDL^+ -CG επιδεικνύει το μικρότερο μέσο αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και υπολογισμών των κλίσεων. Επιπλέον, για τιμές της παραμέτρου t στα διαστήματα $[0.32, 0.42]$, $[0.61, 0.70]$ και $[0.95, 1]$, ο Αλγόριθμος MDL^+ -CG παρουσιάζει τη χειρότερη απόδοση όσον αφορά το υπολογιστικό κόστος και στην περίπτωση όπου $t = 0.995$ ο αλγόριθμος καταγράφει το μικρότερο ποσοστό επιτυχημένης επίλυσης και το μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος.

Ολοκληρώνοντας την ανάλυση μας, αξιολογήσαμε τη καλύτερη και τη χειρότερη επιλογή της παραμέτρου t χρησιμοποιώντας τα προφίλ απόδοσης των Dolan και Moré [38]. Στη συνέχεια παραθέτουμε τους συμβολισμούς των προφίλ απόδοσης.

- «CG-Descent» συμβολίζει στη μέθοδο CG-DESCENT των Hager και Zhang [58], η οποία υλοποιήθηκε με μία γραμμική αναζήτηση, η οποία χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe με παραμέτρους $\sigma_1 = 0.1$ και $\sigma_2 = 0.9$.
- « MDL_1^+ » αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MDL^+ -CG με $t = 0.07$, ο οποίος έχει υλοποιηθεί με την ίδια γραμμική αναζήτηση με τη μέθοδο CG-DESCENT.
- « MDL_2^+ » αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MDL^+ -CG με $t = 0.82$, ο οποίος έχει υλοποιηθεί με την ίδια γραμμική αναζήτηση με τη μέθοδο CG-DESCENT.
- « MDL_1^+ » αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MDL^+ -CG με $t = 0.995$, ο οποίος έχει υλοποιηθεί με την ίδια γραμμική αναζήτηση με τη μέθοδο CG-DESCENT.

Επίσης, στους Πίνακες 7.2 και 7.3 παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων CG-Descent, MDL_1^+ , MDL_2^+ και MDL_3^+ για κάθε πρόβλημα βελτιστοποίησης. Στη συνέχεια παραθέτουμε τους συμβολισμούς στους Πίνακες 7.2 και 7.3. Συγκεκριμένα, ως Dim. συμβολίζουμε τη διάσταση του προβλήματος, ως Iter συμβολίζουμε τον αριθμό των επαναλήψεων, ως FcEn συμβολίζουμε τον αριθμό των συναρτησιακών υπολογισμών, ως GradEn συμβολίζουμε τον αριθμό των υπολογισμών των κλίσεων και ως Time συμβολίζουμε τον υπολογιστικό χρόνο σε δευτερόλεπτα. Επιπλέον, αν ένας αλγόριθμος αποτύχει να συγκλίνει σε κάποιο ελάχιστο με τη δεδομένη ακρίβεια, δηλαδή $\|g_k\|_\infty \leq 10^{-6}$ τότε επισημαίνεται με «Αποτυχία».

No.	Dim.	CG-DESCENT				MDL ₁ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
1	1000	3	29	18	13	3	30	20	14
	5000	22	33	24	14	16	30	20	14
	10000	35	31	20	14	31	30	20	14
2	1000	33	133	70	65	29	133	70	64
	5000	246	155	78	77	144	140	71	69
	10000	340	166	84	82	290	141	71	70
3	1000	6	97	73	35	5	64	43	27
	5000	45	100	78	32	26	69	47	29
	10000	73	103	80	34	51	69	47	29
4	1000	11	146	111	45	9	110	80	41
	5000	43	108	78	41	42	103	74	38
	10000	94	124	95	39	84	103	74	38
5	1000	4	36	21	17	3	27	15	13
	5000	28	36	21	17	16	27	15	13
	10000	43	36	21	17	31	27	15	13
6	1000	8	70	42	36	5	61	31	30
	5000	46	76	43	39	30	69	35	34
	10000	68	75	38	37	67	77	41	38
7	1000	30	351	176	175	31	351	176	175
	5000	368	787	394	393	339	787	394	393
	10000	967	1113	557	556	985	1113	557	556
8	1000	71	346	310	218	66	326	291	205
	5000	768	712	754	488	737	674	714	462
	10000	2267	964	1111	691	2088	914	1050	654
9	1000	2	9	5	4	1	9	5	4
	5000	5	9	5	4	4	9	5	4
	10000	10	9	5	4	9	9	5	4
10	1000	65	389	408	265	73	388	409	265
	5000	745	818	1029	615	788	788	993	593
	10000	2124	1109	1515	874	2244	1068	1457	841
11	1000	53	375	207	191	61	357	198	178
	5000	512	704	394	353	597	762	427	389
	10000	1487	985	566	494	1971	1122	645	577
12	1000	94	342	350	230	110	348	353	233
	5000	1085	688	841	509	1213	704	861	521
	10000	3080	933	1229	720	3380	953	1257	736
13	1000	11	78	63	43	12	79	65	44
	5000	84	116	104	68	102	112	102	66
	10000	199	130	126	80	243	130	126	80
14	1000	6	41	30	23	4	40	28	22
	5000	23	40	31	23	27	39	29	22
	10000	45	38	30	22	58	38	30	22
15	1000	2	25	15	12	3	33	18	16
	5000	8	25	15	12	17	33	18	16
	10000	15	25	15	12	31	33	18	16
16	1000	2	15	8	7	2	13	7	6
	5000	6	15	8	7	6	13	7	6
	10000	13	15	8	7	19	13	7	6
17	1000	12	85	46	43	18	75	41	38
	5000	54	89	48	45	62	86	45	43
	10000	111	88	49	45	126	89	48	45
18	1000	1	5	3	2	0	5	3	2
	5000	1	5	3	2	2	5	3	2
	10000	2	5	3	2	4	5	3	2

(Συνέχεια)

No.	Dim.	CG-DESCENT				MDL ₁ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
19	1000	1	8	5	3	5	8	5	3
	5000	10	8	5	3	11	8	5	3
	10000	15	8	5	3	26	8	5	3
20	1000	1	22	14	9	2	20	13	8
	5000	7	22	14	9	8	20	13	8
	10000	15	22	14	9	25	20	13	8
21	1000	456	1433	1987	992	481	1535	1908	1001
	5000	3258	1803	2797	1520	1164	710	882	433
	10000	4716	1290	2014	1100	7088	2031	3061	1552
22	1000	5	25	13	12	4	21	11	10
	5000	26	25	13	12	26	21	11	10
	10000	49	25	13	12	49	21	11	10
23	1000	38	503	286	245	39	258	148	127
	5000	102	245	144	121	75	154	85	75
	10000	119	152	89	73	133	154	85	75
24	1000	6	57	50	22	13	72	64	28
	5000	36	57	50	22	53	72	64	28
	10000	75	57	50	22	100	72	64	28
25	1000	10	172	135	55	16	152	120	47
	5000	61	169	132	57	66	155	122	47
	10000	123	178	140	58	119	155	122	47
26	1000	6	107	80	128	11	77	48	30
	5000	37	107	80	128	45	76	47	30
	10000	64	107	80	128	85	77	48	30
27	1000	18	175	95	87	26	175	95	87
	5000	217	369	198	184	231	373	200	186
	10000	616	513	278	256	616	511	275	255
28	1000	35	435	259	196	23	251	161	105
	5000	180	339	208	147	343	745	406	354
	10000	314	378	240	165	733	745	406	354
29	1000	12	217	170	68	22	261	211	78
	5000	86	265	209	84	100	266	219	76
	10000	144	241	188	72	188	266	219	76
30	1000	24	351	176	175	27	351	176	175
	5000	235	789	395	394	300	789	395	394
	10000	637	1117	559	558	894	1117	559	558
31	1000	4	28	16	14	4	29	15	14
	5000	14	32	18	16	17	32	18	16
	10000	25	33	17	16	33	34	19	17
32	1000	28	153	119	47	26	155	123	51
	5000	100	120	86	44	105	113	82	43
	10000	175	105	76	39	191	104	80	34
33	1000	67	643	413	349	88	641	412	348
	5000	831	1448	952	797	934	1450	959	800
	10000	2293	2054	1375	1140	2944	2053	1379	1141
34	1000	1	7	4	3	1	7	4	3
	5000	4	7	4	3	4	7	4	3
	10000	8	7	4	3	8	7	4	3
35	1000	12	57	41	32	8	55	40	31
	5000	40	55	43	32	60	51	41	30
	10000	91	54	44	32	97	50	42	30
36	1000	350	1705	1609	1002	60	273	242	127
	5000	8550	8635	7975	5023	650	619	415	299
	10000	33365	16298	17241	10014	1022	415	338	187

(Συνέχεια)

No.	Dim.	CG-DESCENT				MDL ₁ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
37	1000	78	663	332	331	98	667	334	333
	5000	883	1555	778	777	1232	1555	778	777
	10000	2512	2225	1113	1112	3390	2223	1112	1111
38	1000	2	17	10	8	2	17	11	8
	5000	8	17	10	8	14	17	10	8
	10000	18	17	10	8	23	17	10	8
39	1000	2	20	13	9	2	26	18	12
	5000	8	16	11	7	10	18	12	8
	10000	25	16	11	7	15	15	9	7
40	1000	692	5400	2778	2698	640	3617	2231	1797
	5000	6323	10042	5125	5014	3322	4177	2534	2073
	10000	25204	20033	10358	10006	5828	3949	2404	1958
41	1000	1	11	6	5	1	11	6	5
	5000	4	11	6	5	4	11	6	5
	10000	10	11	6	5	8	11	6	5
42	1000	53	184	176	81	14	63	49	24
	5000	269	211	231	96	86	64	58	21
	10000	5024	1754	2416	840	273	100	79	38
43	1000	3	19	10	9	3	17	9	8
	5000	16	19	10	9	16	17	9	8
	10000	34	19	10	9	30	15	8	7
44	1000	11	53	33	20	14	54	34	20
	5000	54	53	33	20	63	54	34	20
	10000	106	53	33	20	130	54	34	20
45	1000	17	80	51	29	15	68	43	25
	5000	78	78	50	28	78	68	43	25
	10000	160	78	51	28	167	66	42	24
46	1000	67	291	146	145	77	287	144	143
	5000	640	569	285	284	851	585	293	292
	10000	1681	751	376	375	2242	755	378	377
47	1000	3188	259	130	129	3465	259	130	129
	5000	29070	109	57	54	36154	113	59	56
	10000	34769	31	17	15	38756	31	17	15
48	1000	8	84	43	41	11	73	37	36
	5000	39	69	35	34	55	81	41	40
	10000	69	67	34	33	95	75	38	37
49	1000	28	351	176	175	39	351	176	175
	5000	300	789	395	394	353	789	395	394
	10000	832	1117	559	558	1053	1117	559	558
50	1000	39	331	166	165	45	331	166	165
	5000	427	743	372	371	507	743	372	371
	10000	1189	1051	526	525	1400	1051	526	525
51	1000	7	43	31	24	10	42	29	23
	5000	38	37	28	21	41	42	32	24
	10000	84	39	32	23	81	41	33	24
52	1000	7	73	37	36	10	73	37	36
	5000	47	89	45	44	45	89	45	44
	10000	89	95	48	47	106	95	48	47
53	1000	171	1999	1000	999	196	1999	1000	999
	5000	4435	9999	5000	4999	5406	9999	5000	4999
	10000	16399	19999	10000	9999	21634	19999	10000	9999
54	1000	5	40	25	19	7	54	35	25
	5000	28	48	32	21	30	46	30	21
	10000	76	60	41	25	63	48	31	21

(Συνέχεια)

No.	Dim.	CG-DESCENT				MDL ₁ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
55	1000	2	9	5	4	1	9	5	4
	5000	4	9	5	4	6	9	5	4
	10000	11	9	5	4	8	9	5	4
56	1000	255	3961	1982	1980	353	3983	1993	1991
	5000	2947	10001	5002	5000	4138	10001	5002	5000
	10000	11832	20001	10002	10000	15609	20001	10002	10000
57	1000	134	441	263	202	127	392	238	179
	5000	1101	755	445	355	«Αποτυχία»			
	10000	3200	1085	649	505	«Αποτυχία»			
58	1000	112	401	212	189	116	366	192	174
	5000	937	679	354	327	1028	656	337	319
	10000	2407	877	452	426	2500	802	410	392
59	1000	149	499	307	226	«Αποτυχία»			
	5000	«Αποτυχία»				«Αποτυχία»			
	10000	«Αποτυχία»				«Αποτυχία»			
60	1000	71	287	144	143	77	285	143	142
	5000	648	567	284	283	798	567	284	283
	10000	1780	779	390	389	2123	777	389	388
61	1000	111	385	229	176	112	351	218	158
	5000	2572	1823	1142	788	1564	893	637	412
	10000	3457	1230	785	532	«Αποτυχία»			
62	1000	130	417	233	191	149	425	231	194
	5000	964	661	368	307	1268	736	398	340
	10000	3009	1028	579	476	3158	942	498	445
63	1000	2716	8550	4662	4001	2215	6236	3236	3002
	5000	26313	16815	9136	7679	22464	12125	6699	5452
	10000	46281	14744	8201	6543	37616	9587	5341	4259
64	1000	8	47	30	25	5	41	27	22
	5000	29	44	30	24	24	40	28	22
	10000	44	42	32	24	38	39	26	21
65	1000	525	5930	2995	2936	617	5209	2608	2601
	5000	12478	29526	14954	14578	11359	19541	9795	9749
	10000	31224	40021	20389	19642	34810	31053	15563	15493
66	1000	7	27	22	11	7	28	21	11
	5000	35	26	22	10	40	26	20	10
	10000	70	26	22	10	74	25	21	10
67	1000	1	15	8	7	1	17	9	8
	5000	5	15	8	7	6	17	9	8
	10000	12	15	8	7	16	17	9	8
68	1000	10	64	50	27	8	47	38	19
	5000	43	61	49	25	41	47	38	19
	10000	84	59	49	24	82	47	38	19
69	1000	432	2026	1190	960	149	512	389	206
	5000	5225	4939	2848	2336	3109	2113	1524	914
	10000	30137	14384	7759	7095	9029	3256	2046	1450
70	1000	49	1001	501	500	72	1001	501	500
	5000	1210	5001	2501	2500	1830	5001	2501	2500
	10000	4917	10001	5001	5000	7325	10001	5001	5000
71	1000	1	1	1	0	1	1	1	0
	5000	1	1	1	0	1	1	1	0
	10000	1	1	1	0	1	1	1	0

(Συνέχεια)

No.	Dim.	CG-DESCENT				MDL ₁ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
72	1000	27	389	195	194	34	389	195	194
	5000	272	875	438	437	395	875	438	437
	10000	760	1239	620	619	1128	1239	620	619
73	1000	6	101	51	50	9	101	51	50
	5000	68	233	117	116	96	233	117	116
	10000	195	331	166	165	287	331	166	165

Πίνακας 7.2: Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων CG-Descent και MDL₁⁺-CG

No.	Dim.	MDL ₂ ⁺				MDL ₃ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
1	1000	3	30	20	14	5	30	20	14
	5000	16	30	20	14	24	30	20	14
	10000	32	30	20	14	41	30	20	14
2	1000	28	129	66	63	27	125	63	62
	5000	140	136	69	67	158	150	78	72
	10000	315	151	76	75	312	149	75	74
3	1000	6	89	66	31	7	93	71	31
	5000	33	89	67	31	34	90	68	31
	10000	65	89	67	31	71	90	68	31
4	1000	9	107	81	34	6	77	52	28
	5000	43	107	81	34	41	84	60	32
	10000	86	107	81	34	80	84	60	32
5	1000	4	28	16	13	4	28	16	13
	5000	17	28	16	13	24	28	16	13
	10000	34	28	16	13	66	28	16	13
6	1000	5	61	31	30	11	61	31	30
	5000	30	69	35	34	43	69	35	34
	10000	68	77	41	38	89	77	41	38
7	1000	31	351	176	175	37	351	176	175
	5000	349	787	394	393	409	787	394	393
	10000	1148	1113	557	556	1134	1113	557	556
8	1000	68	326	291	205	65	326	291	205
	5000	833	674	714	462	817	674	714	462
	10000	2336	914	1050	654	2129	914	1050	654
9	1000	1	9	5	4	1	9	5	4
	5000	4	9	5	4	4	9	5	4
	10000	13	9	5	4	10	9	5	4
10	1000	74	388	409	265	72	388	409	265
	5000	823	788	993	593	779	788	993	593
	10000	2137	1068	1457	841	2374	1068	1457	841

(Συνέχεια)

No.	Dim.	MDL ₂ ⁺				MDL ₃ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
11	1000	57	357	194	169	69	404	236	195
	5000	621	819	482	398	667	837	491	392
	10000	1807	1162	683	564	1690	1072	607	503
12	1000	99	348	353	233	110	348	353	233
	5000	1167	704	861	521	1101	704	861	521
	10000	3198	953	1257	736	3194	953	1257	736
13	1000	16	79	65	44	11	79	65	44
	5000	98	112	102	66	90	112	102	66
	10000	228	130	126	80	225	130	126	80
14	1000	6	40	28	22	6	40	28	22
	5000	35	39	29	22	28	39	29	22
	10000	74	38	30	22	49	38	30	22
15	1000	7	50	34	24	2	35	22	17
	5000	23	50	34	24	22	35	22	17
	10000	41	50	34	24	45	35	22	17
16	1000	1	13	7	6	2	13	7	6
	5000	9	13	7	6	10	13	7	6
	10000	21	13	7	6	21	13	7	6
17	1000	13	75	41	38	12	76	43	39
	5000	64	86	45	43	55	86	45	43
	10000	162	89	48	45	129	89	48	45
18	1000	0	5	3	2	1	5	3	2
	5000	2	5	3	2	1	5	3	2
	10000	4	5	3	2	2	5	3	2
19	1000	5	8	5	3	2	8	5	3
	5000	9	8	5	3	8	8	5	3
	10000	31	8	5	3	17	8	5	3
20	1000	2	20	13	8	2	20	13	8
	5000	13	20	13	8	10	20	13	8
	10000	23	20	13	8	16	20	13	8
21	1000	512	1543	1902	1001	473	1515	1899	1002
	5000	3296	1743	2632	1457	4259	2606	3793	1821
	10000	10110	2765	4131	1956	9494	2907	4335	2058
22	1000	6	21	11	10	4	21	11	10
	5000	21	21	11	10	24	21	11	10
	10000	45	21	11	10	41	21	11	10
23	1000	177	2008	1175	1002	164	2005	1228	1002
	5000	1063	2308	1401	1152	908	2177	1358	1088
	10000	2247	2308	1401	1152	1804	2177	1358	1088
24	1000	7	64	56	24	9	73	68	28
	5000	41	64	56	24	45	73	68	28
	10000	85	64	56	24	91	73	68	28
25	1000	12	151	120	47	16	179	142	59
	5000	87	194	160	59	79	201	159	64
	10000	160	194	160	59	144	201	159	64
26	1000	7	76	47	30	7	77	48	30
	5000	37	76	47	30	37	76	47	30
	10000	71	77	48	30	68	76	47	30
27	1000	26	173	94	86	25	173	94	86
	5000	266	373	202	186	223	373	202	186
	10000	731	511	277	255	583	511	275	255
28	1000	74	729	399	348	58	630	338	299
	5000	166	311	194	138	166	379	221	173
	10000	408	378	218	172	384	437	245	202

(Συνέχεια)

No.	Dim.	MDL ₂ ⁺				MDL ₃ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
29	1000	16	259	209	75	13	199	157	59
	5000	97	280	234	77	65	189	149	59
	10000	208	285	237	79	126	189	149	59
30	1000	30	351	176	175	25	351	176	175
	5000	316	789	395	394	277	789	395	394
	10000	876	1117	559	558	771	1117	559	558
31	1000	2	29	15	14	2	29	15	14
	5000	24	32	18	16	22	32	18	16
	10000	36	34	21	17	40	34	21	17
32	1000	29	136	108	47	19	112	90	33
	5000	91	111	84	38	97	116	85	43
	10000	212	112	88	38	192	118	91	38
33	1000	84	641	412	348	78	641	412	348
	5000	1011	1450	959	800	863	1450	959	800
	10000	2916	2053	1379	1141	2432	2053	1379	1141
34	1000	0	7	4	3	0	7	4	3
	5000	3	7	4	3	3	7	4	3
	10000	8	7	4	3	5	7	4	3
35	1000	9	55	40	31	9	55	40	31
	5000	46	53	42	31	43	53	42	31
	10000	139	52	43	31	84	52	43	31
36	1000	75	194	164	92	48	237	219	109
	5000	1077	584	462	266	10128	6162	7078	3464
	10000	35182	11637	14530	6405	36825	15524	18757	9658
37	1000	102	667	334	333	91	667	334	333
	5000	1216	1555	778	777	1016	1555	778	777
	10000	3468	2225	1113	1112	2893	2225	1113	1112
38	1000	2	17	11	8	2	17	11	8
	5000	15	17	10	8	9	17	10	8
	10000	25	17	10	8	27	17	10	8
39	1000	3	26	18	12	3	26	18	12
	5000	9	18	12	8	9	18	12	8
	10000	22	15	9	7	16	15	9	7
40	1000	1268	7054	4019	3523	1299	8723	4745	4357
	5000	8528	10111	5344	5052	6999	10044	5085	5018
	10000	34724	20036	10200	10012	32511	20028	10159	10009
41	1000	1	11	6	5	0	11	6	5
	5000	4	11	6	5	5	11	6	5
	10000	8	11	6	5	10	11	6	5
42	1000	17	69	56	21	19	62	54	26
	5000	84	70	59	25	547	390	314	191
	10000	7571	2482	3389	1378	31455	9322	10676	5538
43	1000	3	17	9	8	4	19	10	9
	5000	16	17	9	8	18	17	9	8
	10000	35	17	9	8	33	17	9	8
44	1000	18	56	35	21	12	56	35	21
	5000	71	56	35	21	73	56	35	21
	10000	129	56	35	21	142	56	35	21
45	1000	16	68	43	25	19	68	43	25
	5000	73	68	43	25	86	68	43	25
	10000	163	66	42	24	168	66	42	24
46	1000	79	291	146	145	80	291	146	145
	5000	703	563	282	281	841	571	286	285
	10000	1843	759	380	379	2191	759	380	379

(Συνέχεια)

No.	Dim.	MDL ₂ ⁺				MDL ₃ ⁺			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
47	1000	2801	259	130	129	3335	259	130	129
	5000	30154	113	59	56	33882	113	59	56
	10000	35649	31	17	15	36243	31	17	15
48	1000	8	73	37	36	10	73	37	36
	5000	45	83	42	41	45	83	42	41
	10000	95	77	39	38	93	77	39	38
49	1000	30	351	176	175	34	351	176	175
	5000	367	789	395	394	373	789	395	394
	10000	1009	1117	559	558	1056	1117	559	558
50	1000	43	331	166	165	46	331	166	165
	5000	464	743	372	371	495	743	372	371
	10000	1371	1051	526	525	1441	1051	526	525
51	1000	7	40	28	22	7	40	28	22
	5000	43	42	32	24	37	42	32	24
	10000	82	41	33	24	94	41	33	24
52	1000	8	73	37	36	15	73	37	36
	5000	45	89	45	44	51	89	45	44
	10000	103	95	48	47	120	95	48	47
53	1000	204	1999	1000	999	219	1999	1000	999
	5000	5175	9999	5000	4999	5415	9999	5000	4999
	10000	19929	19999	10000	9999	21709	19999	10000	9999
54	1000	7	52	34	24	8	52	34	24
	5000	30	44	28	21	34	52	35	21
	10000	60	48	31	21	74	48	31	21
55	1000	1	9	5	4	1	9	5	4
	5000	7	9	5	4	6	9	5	4
	10000	14	9	5	4	9	9	5	4
56	1000	318	3991	1997	1995	377	3987	1995	1993
	5000	3443	10001	5002	5000	4259	10001	5002	5000
	10000	13914	20001	10002	10000	17143	20001	10002	10000
57	1000	162	537	327	240	159	485	300	215
	5000	2677	1769	1322	724		«Αποτυχία»		
	10000		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
58	1000	124	402	210	192	152	432	225	207
	5000	1065	738	378	360	1307	754	386	368
	10000	2694	940	479	461	3327	986	502	484
59	1000	201	631	411	270		«Αποτυχία»		
	5000		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
	10000		«Αποτυχία»				«Αποτυχία»		
60	1000	69	283	142	141	81	283	142	141
	5000	687	563	282	281	816	561	281	280
	10000	1876	759	380	379	2184	757	379	378
61	1000	136	450	273	208	175	511	323	216
	5000	2077	1335	1041	555		«Αποτυχία»		
	10000	5410	1762	1349	768		«Αποτυχία»		
62	1000	134	438	241	199	159	430	240	190
	5000	1154	747	410	337	1327	720	395	326
	10000	2933	963	526	438	3722	1018	553	470
63	1000	2819	8521	4542	4001	3393	8500	4505	4002
	5000	35973	22080	12076	10004	36805	21336	11784	9552
	10000	60109	18726	10653	8073	67928	21173	12044	9129
64	1000	4	41	27	22	4	41	27	22
	5000	19	40	28	22	19	40	28	22
	10000	38	40	28	22	38	40	28	22

(Συνέχεια)

No.	Dim.	MDL_2^+				MDL_3^+			
		Iter	Nfun	Ngrad	Time	Iter	Nfun	Ngrad	Time
65	1000	516	5187	2597	2590	522	5193	2600	2593
	5000	9082	19302	9665	9639	9146	19257	9643	9616
	10000	38773	40903	20467	20438	36879	38943	19487	19458
66	1000	8	27	22	11	7	27	22	11
	5000	34	26	20	10	34	26	20	10
	10000	69	25	21	10	69	25	21	10
67	1000	1	17	9	8	1	15	8	7
	5000	7	17	9	8	6	15	8	7
	10000	13	17	9	8	11	15	8	7
68	1000	8	47	38	19	8	47	38	19
	5000	36	47	38	19	35	47	38	19
	10000	70	47	38	19	71	47	38	19
69	1000	130	549	384	231	127	543	376	226
	5000	1540	1323	975	521	1781	1579	1069	671
	10000	5626	2496	1730	1026	8243	3605	2487	1557
70	1000	59	1001	501	500	60	1001	501	500
	5000	1472	5001	2501	2500	1483	5001	2501	2500
	10000	5907	10001	5001	5000	5901	10001	5001	5000
71	1000	1	1	1	0	1	1	1	0
	5000	1	1	1	0	1	1	1	0
	10000	1	1	1	0	1	1	1	0
72	1000	29	389	195	194	29	389	195	194
	5000	324	875	438	437	328	875	438	437
	10000	913	1239	620	619	925	1239	620	619
73	1000	7	101	51	50	7	101	51	50
	5000	84	233	117	116	86	233	117	116
	10000	238	331	166	165	242	331	166	165

Πίνακας 7.3: Αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων MDL_2^+ -CG και MDL_3^+ -CG

Οι Εικόνες 7.3 και 7.4 παρουσιάζουν τα προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-DESCENT, MDL_1^+ , MDL_2^+ και MDL_3^+ , όσον αφορά τους συναρτησιακούς υπολογισμούς και τους υπολογισμούς κλίσεων. Προφανώς, η MDL_1^+ επιδεικνύει την καλύτερη απόδοση όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης, ενώ δεύτερη σε απόδοση είναι η MDL_2^+ . Συγκεκριμένα, η MDL_1^+ επιλύει το 64.4% και το 66.2% των προβλημάτων με το μικρότερο αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και υπολογισμών κλίσεων, αντίστοιχα ενώ η CG-DESCENT επιλύει το 48.8% και το 47% των προβλημάτων, αντίστοιχα. Επιπλέον, η MDL_2^+ είναι η πιο αποδοτική από τη CG-DESCENT μιας που επιλύει το 55.3% και το 53% των προβλημάτων με το μικρότερο αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και υπολογισμών κλίσεων, αντίστοιχα. Όσον αφορά την αποτελεσματικότητα η MDL_2^+ και η CG-DESCENT παρουσιάζουν τα καλύτερα αποτελέσματα μιας που είναι οι μόνες μέθοδοι που επιλύουν επιτυχημένα τα 216 από τα 219 προβλήματα. Επίσης, η MDL_3^+ καταγράφει τη χειρότερη απόδοση μίας που αντιστοιχεί στην κατώτερη καμπύλη όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης.

Εικόνα 7.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, MDL₁⁺, MDL₂⁺ και MDL₃⁺ ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς

Εικόνα 7.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων CG-Descent, MDL₁⁺, MDL₂⁺ και MDL₃⁺ ως προς τους υπολογισμούς των κλίσεων

7.6 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάσαμε μία νέα μέθοδος συζυγών κλίσεων, η οποία αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Dai-Liao. Η νέα μέθοδος εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Επίσης, μία πολύ σημαντική ιδιότητα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την επιφάνειας της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας, η οποία προτάθηκε από τους Babaie-Kafaki et al. [13]. Επιπλέον, η μέθοδος συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe.

Με βάση τα αριθμητικά μας αποτελέσματα καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι η νέα μέθοδος έχει μεγάλη αποδοτικότητα, όπως και καλή ταχύτητα επίλυσης των προβλημάτων, η οποία όμως εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την τιμή της παραμέτρου t .

Μέρος IV

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Η ιδέα των τεχνητών νευρωνικών δικτύων (artificial neural networks) έχει προέλθει από τον τρόπο λειτουργίας των βιολογικών νευρωνικών δικτύων του ανθρώπινου εγκεφάλου. Η προσπάθεια για την κατανόηση του εγκεφάλου, αρχικά οφείλεται όταν στην πρωτοποριακή εργασία του Bain, ο οποίος πρότεινε τη μελέτη του ανθρώπινου εγκεφάλου ως ένα δίκτυο που μεταδίδει σήματα (signal transmitting network). Παρόλο που οι βιολογικοί νευρώνες είναι εξαιρετικά πιο αργοί από τις λογικές πύλες που κατασκευάζονται από σιλικόνη εντούτοις ο εγκεφαλός, αναπληρώνει την σχετικά αργή ταχύτητα επεξεργασίας που έχουν οι νευρώνες του με την ύπαρξη ενός εξαιρετικά μεγάλου αριθμού νευρώνων (περίπου 10^{12}) με πάρα πολλές συνδέσεις μεταξύ τους (περίπου 6×10^{15}) [120].

Ο ανθρώπινος εγκεφαλός είναι ένας ιδιαίτερα πολύπλοκος, μη γραμμικός και παράλληλος ηλεκτρονικός υπολογιστής αν τον θεωρήσουμε ως ένα σύστημα επεξεργασίας πληροφοριών. Έχει την ικανότητα να οργανώνει τους νευρώνες με τέτοιο τρόπο ώστε να κάνει συγκεκριμένους υπολογισμούς, όπως για π.χ. την αναγνώριση προτύπων, τη κατανόηση της ομιλίας, τη κίνηση, κ.α. πολύ πιο γρήγορα από τον γρηγορότερο ηλεκτρονικό υπολογιστή που υπάρχει [28].

Στη γενική του μορφή, ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι μία μηχανή που έχει σχεδιαστεί για να μοντελοποιεί τον τρόπο με τον οποίο ο εγκεφαλός εκτελεί μία συγκεκριμένη εργασία. Το δίκτυο συνήθως υλοποιείται με την χρήση ηλεκτρονικών εξαρτημάτων ή προσομοιώνεται με τη χρήση λογισμικού σε έναν ηλεκτρονικό υπολογιστή. Συνοψίζοντας στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον ορισμό ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Ορισμός 8.1. [2]. (Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο). Ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (ΤΝΔ) είναι ένας παράλληλος και καταναμημένος επεξεργαστής, το οποίο αποτελείται από έναν αριθμό από ανεξάρτητες υπολογιστικές μονάδες επεξεργασίας που ονομάζονται *νευρώνες* (neurons), οι οποίοι είναι διασυνδεδεμένοι μεταξύ τους σε *σρώματα* (layers).

Με άλλα λόγια, ένα ΤΝΔ είναι ένας μαζικά παράλληλος καταναμημένος επεξεργαστής, που έχει μία φυσική κλίση στο να αποθηκεύει εμπειρική γνώση και έχει την ικανότητα να την χρησιμοποιήσει. Ένα ΤΝΔ ομοιάζει τον ανθρώπινο εγκεφαλό με δύο τρόπους:

1. Η γνώση λαμβάνεται στο δίκτυο από το περιβάλλον μέσω μίας διαδικασίας εκπαίδευσης.

2. Η αποθήκευση της γνώσης γίνεται μέσω των *συνάψεων* (synapses) που υπάρχουν στις διασυνδέσεις μεταξύ των νευρώνων και ονομάζονται *βάρη* (weights).

Η διαδικασία που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση ενός ΤΝΔ ονομάζεται *αλγόριθμος εκπαίδευσης* (training algorithm) και ο σκοπός της είναι να μεταβάλει τα βάρη των διασυνδέσεων του δικτύου έτσι ώστε το δίκτυο να παράγει την επιθυμητή έξοδο [61]. Εκτός από την μεταβολή των βαρών ενός ΤΝΔ, το δίκτυο έχει την δυνατότητα να μεταβάλει και την τοπολογία του, όπως συμβαίνει και στους νευρώνες του ανθρώπινου εγκεφάλου όταν κάποιοι από αυτούς σταματούν να λειτουργούν και πεθαίνουν ενώ κάποιοι άλλοι δημιουργούν νέες συνδέσεις.

8.1 Κίνητρα Ανάπτυξης των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Το κίνητρο για την έρευνα των ΤΝΔ είναι η πίστη ότι οι ανθρώπινες ικανότητες, που αφορούν στην οπτική αντίληψη του πραγματικού χρόνου, στην κατανόηση της ομιλίας, στην επεξεργασία αισθητηριακών πληροφοριών και στην προσαρμοστικότητα όπως επίσης και στην έξυπνη λήψη αποφάσεων, προέρχονται από οργανωτικές και υπολογιστικές αρχές, επιδεικνύοντας το πολύπλοκο νευρωνικό δίκτυο του ανθρώπινου εγκεφάλου. Για να δικαιολογήσουμε τους παραπάνω ισχυρισμούς, ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να ερμηνεύσουμε το παρακάτω σχήμα:

Ο έχ_ν δύο χει_ώ_ας
να δί_ει τον έν_ν,

Όσα δεν φ_άνει η αλε_ού
τα κά_ει κρ_μαστ_ρια.

Αν προσπαθήσουμε διαβάζοντας σειριακά ένα γράμμα τη φορά από τα αριστερά προς τα δεξιά, όπως θα έκανε ένας υπολογιστής, είναι εξαιρετικά δύσκολο, αν όχι αδύνατο, να καταλάβουμε το νόημα [151]. Αν όμως κοιτάξουμε όλο το σχήμα θα καταλάβουμε εύκολα ότι αποτελείται από δύο τμήματα και με λίγη προσπάθεια θα βρούμε τις δύο γνωστές παροιμίες. Έτσι φαίνεται ότι μπορέσαμε να κάνουμε κάτι που ακόμα και οι πιο ισχυροί υπολογιστές δυσκολεύονται ή αποτυγχάνουν αν δεν έχουν τις ειδικές συντακτικές γνώσεις και την εμπειρία που διαθέτουν οι άνθρωποι. Το ανθρώπινο μυαλό, αν και είναι σαφώς πιο αργό από έναν σύγχρονο υπολογιστή, υπερίσχυσε.

Πριν δώσουμε απάντηση για ποιο λόγο συμβαίνει αυτό ας δούμε ένα ακόμα παράδειγμα. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος για να εκτελέσει αναγνώριση προσώπων, δηλαδή για να αναγνωρίσει γνωστά μας πρόσωπα σε άγνωστα περιβάλλοντα, χρειάζεται περίπου 100-200 χιλιοστά του δευτερολέπτου, ενώ ένας πολύ ισχυρός σύγχρονος ηλεκτρονικός υπολογιστής θα χρειαζόταν ίσως ολόκληρες ημέρες για να εκτελέσει μία τέτοια λειτουργία [28]. Και πάλι ο ανθρώπινος εγκέφαλος υπερίσχυει. Υπάρχουν δύο λόγοι για αυτό: η δυνατότητα *εκπαίδευσης* και η *παράλληλη επεξεργασία των δεδομένων*. Η ικανότητα του ανθρώπινου εγκεφάλου να φτιάχνει από μικρή ηλικία και διαρκώς να διορθώνει κανόνες (αυτό που συνήθως ονομάζουμε εμπειρία), καθώς και η δυνατότητά του για μαζική παράλληλη επεξεργασία δεδομένων, του δίνει πλεονέκτημα απέναντι στους σημερινούς σειριακούς υπολογιστές σε πολλά προβλήματα που απαιτούν λύση σε πραγματικό χρόνο (real time).

Επίσης, ένα άλλο χαρακτηριστικό του ανθρώπινου εγκεφάλου είναι η *πλαστικότητα*, η ικανότητα δηλαδή του νευρικού συστήματος να προσαρμόζεται στο περιβάλλον. Στον εγκέφαλο ενός ενήλικου ανθρώπου, η πλαστικότητα εκφράζεται με την δημιουργία νέων συνάψεων μεταξύ των νευρώνων και με την τροποποίηση των ήδη υπαρχόντων. Όπως στον ανθρώπινο εγκέφαλο, έτσι και στα ΤΝΔ η πλαστικότητα είναι απαραίτητη για την λειτουργία των νευρώνων σαν αυτόνομες μονάδες επεξεργασίας πληροφοριών.

Έτσι, η εξομοίωση του παράλληλου ανθρώπινου εγκεφάλου (έστω και με τη χρήση σειριακών υπολογιστών), έχει πολλά να προσφέρει στην επίλυση καθημερινών προβλημάτων που με τις συνήθεις μεθόδους φαίνονται άλυτα. Γι' αυτό και σήμερα με τη βοήθεια της Βιολογίας, των Γνωστικών Επιστημών και της Νευροεπιστήμης προσπαθούμε να κατανοήσουμε όσο το δυνατόν καλύτερα τον ανθρώπινο εγκέφαλο, που αποτελεί τον τελειότερο παράλληλο επεξεργαστή που γνωρίζουμε. Ελπίζουμε, έτσι, να χρησιμοποιήσουμε πολλά από αυτά τα στοιχεία για να φτιάξουμε τον μελλοντικό παράλληλο υπολογιστή, που πιθανώς θα βασίζεται στην παράλληλη επεξεργασία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων.

8.2 Ιστορική Αναδρομή

Σε αυτήν την ενότητα, θα προσπαθήσουμε να κάνουμε μία σύντομη ιστορική αναδρομή και να αναφέρουμε τις σημαντικότερες στιγμές μελέτης των ΤΝΔ και των αλγορίθμων εκπαίδευσής τους.

Η ιστορία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων κατά πολλούς άρχισε το 1873, όταν ο ψυχολόγος Alexander Bain πρότεινε τη μελέτη του ανθρώπινου εγκεφάλου σαν ένα δίκτυο που μεταδίδει σήματα (signal transmitting network). Η νέα εποχή των νευρωνικών δικτύων ξεκίνησε το 1943 με την πρωτοποριακή δουρεία των McCulloch και Pitts [91], με την οποία έδειξαν ότι τα ΤΝΔ μπορούν γενικά να υπολογίσουν κάθε αριθμητική και λογική συνάρτηση.

Η επόμενη σημαντική εξέλιξη έγινε το 1986 όπου παρουσιάστηκε ο *αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος* (backpropagation algorithm) από τους Rumelhart, Hinton και Williams [117]. Τον ίδιο χρόνο, δημοσιεύτηκε το βιβλίο, «Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition» από τους Rumelhart και McClelland [118], το οποίο είχε μεγάλη επιρροή στην εκπαίδευση με τη χρήση του αλγόριθμου της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος, η οποίος εμφανίστηκε στο προσκήνιο ως ο δημοφιλέστερος αλγόριθμος εκπαίδευσης πολυεπίπεδων ΤΝΔ.

Τα νευρωνικά δίκτυα έχουν βέβαια διανύσει ένα μακρύ δρόμο από τις πρώιμες μέρες των McCulloch και Pitts. και έχουν καθιερωθεί ως ένα θέμα που περιλαμβάνει διαφορετικές αρχές με βαθιές ρίζες στις νευροεπιστήμες, στη ψυχολογία, στα μαθηματικά, στις φυσικές επιστήμες και στη μηχανολογία. Τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί αρκετές αρχιτεκτονικές ΤΝΔ και αλγόριθμοι εκπαίδευσης. Η τρέχουσα έρευνα κινείται προς την κατεύθυνση επίλυσης σύγχρονων και δύσκολων προβλημάτων αλλά και προς τη μαθηματική θεμελίωση των αποτελεσμάτων της. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [2, 5, 28, 57, 61, 149].

8.3 Από τα Βιολογικά στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Σε αυτό το σημείο αξίζει να υπενθυμίσουμε ότι οι νευρώνες ενός ΤΝΔ θεωρούνται συνήθως ως απλουστευμένα πρότυπα των βιολογικών νευρώνων και στις μεταξύ τους συνδέσεις αντιστοιχεί ένας πραγματικός αριθμός που ονομάζεται βάρος και χρησιμοποιείται για την τροποποίηση των εισόδων του νευρώνα. Κάθε νευρώνας (εκτός από αυτούς που βρίσκονται στο στρώμα εισόδου) θεωρούμε ότι έχει μία ακόμα σύνδεση με σταθερή είσοδο την τιμή 1 και έχει ένα βάρος που ονομάζεται *μεροληψία* (bias). Η χρήση της μεροληψίας βελτιώνει την ικανότητα γενίκευσης του δικτύου. Η εμπειρία και η γνώση που αποκτά το ΤΝΔ αποθηκεύεται στα βάρη του και η προσαρμογή των τιμών των βαρών γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε το ΤΝΔ να έχει την επιθυμητή απόκριση μέσω της διαδικασίας της *εκπαίδευσης* (training).

Κάθε νευρώνας βρίσκεται σε μία εσωτερική κατάσταση, η οποία ονομάζεται *επίπεδο ενεργοποίησης* που αποτελεί την έξοδο του νευρώνα και εξαρτάται από τις εισόδους που λαμβάνονται. Τα περισσότερα ΤΝΔ για να υπολογίσουν την ενεργοποίησή τους υπολογίζουν το γινόμενο κάθε εισόδου επί το αντίστοιχο βάρος και αθροίζουν όλα αυτά τα γινόμενα. Τελικά η ενεργοποίηση είναι η εικόνα του αποτελέσματος μέσω μίας *συνάρτησης ενεργοποίησης* (activation function). Συχνά, ο ρόλος της συνάρτησης ενεργοποίησης είναι ο περιορισμός της ενεργοποίησης σε κάποιο επιθυμητό διάστημα. Οι πιο γνωστές συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι οι ακόλουθες:

1. Η δυαδική συνάρτηση με κατώφλι θ .

$$\phi_1(x) = \begin{cases} 0, & x < \theta; \\ 1, & x \geq \theta. \end{cases}$$

2. Η διπολική συνάρτηση με κατώφλι θ .

$$\phi_2(x) = \begin{cases} -1, & x < \theta; \\ 1, & x \geq \theta. \end{cases}$$

3. Η ταυτοτική συνάρτηση.

$$\phi_3(x) = x.$$

4. Η κατά τμήματα γραμμική συνάρτηση.

$$\phi_4(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -1/2; \\ x, & -1/2 < x < 1/2; \\ 1, & x > 1/2. \end{cases}$$

5. Η λογιστική συνάρτηση.

$$\phi_5(x) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha x}}.$$

6. Η συνάρτηση της υπερβολικής εφαπτομένης.

$$\phi_6(x) = \tanh(\beta x).$$

Οι παράμετροι α και β καθορίζουν την μορφή της σιγμοειδούς ϕ_4 και ϕ_5 , αντίστοιχα [61]. Οι συναρτήσεις ενεργοποίησης ϕ_1 και ϕ_2 περιορίζουν την έξοδο του νευρώνα στις τιμές $\{0, 1\}$ και $\{-1, 1\}$, αντίστοιχα. Επίσης, οι ϕ_4 , ϕ_5 και ϕ_6 περιορίζουν την ενεργοποίηση του νευρώνα στο διάστημα $(0, 1)$, $(0, 1)$ και $(-1, 1)$, αντίστοιχα. Τέλος, η ϕ_3 επιτρέπει αυθαίρετα μικρές ή μεγάλες ενεργοποιήσεις.

8.4 Αρχιτεκτονικές Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Ο τρόπος με τον οποίο οι νευρώνες ενός ΤΝΔ είναι δομημένοι ονομάζεται *τοπολογία* ή *αρχιτεκτονική* του ΤΝΔ (neural network architecture) και είναι στενά συνδεδεμένος με τον αλγόριθμο εκπαίδευσης που χρησιμοποιείται για το δίκτυο. Υπενθυμίζουμε ότι είναι βολικό να βλέπουμε τους νευρώνες σαν να είναι τοποθετημένοι σε στρώματα. Όλοι οι νευρώνες ενός στρώματος έχουν συνήθως την ίδια συνάρτηση ενεργοποίησης και συμπεριφέρονται με τον ίδιο τρόπο. Κάθε ΤΝΔ έχει τουλάχιστον δύο στρώματα: το *στρώμα εισόδου* (input layer) και το *στρώμα εξόδου* (output layer).

Αν ένα ΤΝΔ αποτελείται και από στρώματα ανάμεσα στο στρώμα εισόδου και στο στρώμα εξόδου, τότε αυτά ονομάζονται *κρυφά στρώματα* (hidden layers) και το ΤΝΔ ονομάζεται *πολυστρωματικό*. Σημειώνουμε ότι τα πολυστρωματικά ΤΝΔ είναι δυσκολότερο να εκπαιδευτούν και απαιτούν εξαιρετική προσοχή στο σχεδιασμό τους, αλλά μπορούν να επιλύσουν δύσκολα υπολογιστικά και πραγματικά προβλήματα [61]. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τις τρεις βασικές κλάσεις αρχιτεκτονικών νευρωνικών δικτύων.

8.4.1 Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητών Νευρωνικά Δίκτυα Ενός Επιπέδου

Στα ΤΝΔ οι νευρώνες του δικτύου οργανώνονται σε διάφορα επίπεδα. Η πιο απλή μορφή νευρωνικού δικτύου με επίπεδα είναι ένα νευρωνικό δίκτυο με ένα επίπεδο. Στην περίπτωση αυτή έχουμε ένα επίπεδο με κόμβους εισόδου που προβάλλονται σε ένα επίπεδο εξόδου με

Εικόνα 8.1: Εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο ενός επιπέδου

νευρώνες (όπου γίνονται οι υπολογισμοί), ενώ το αντίθετο δεν ισχύει, δεν μπορούμε δηλαδή να πάρουμε από τους νευρώνες εξόδου στους κόμβους εισόδου. Σε αυτή την περίπτωση, το δίκτυο είναι ένα αυστηρά εμπρόσθιας τροφοδότησης (feedforward) δίκτυο και καλείται *εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο ενός επιπέδου* (feedforward single layer neural network). Με τον όρο «ένα επίπεδο» εννοούμε το επίπεδο εξόδου που περιέχει και τους νευρώνες όπου γίνονται οι υπολογισμοί (Εικόνα 8.1). Σημειώνεται ότι δεν υπολογίζεται το επίπεδο εισόδου με τους κόμβους εισόδου γιατί σε αυτό δεν γίνονται καθόλου υπολογισμοί.

8.4.2 Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Πολλαπλών Επιπέδων

Η δεύτερη κλάση εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικών δικτύων διαφέρει από την πρώτη στην ύπαρξη ενός ή περισσότερων κρυφών επιπέδων, των οποίων οι νευρώνες καλούνται κρυφοί νευρώνες. Στη συνέχεια της εργασίας τα εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικά δίκτυα, θα καλούνται εν συντομία ΕΤΝΔ. Η λειτουργία των κρυφών νευρώνων είναι να παρεμβάλλονται μεταξύ των κόμβων εισόδου και των νευρώνων εξόδου του δικτύου. Με την προσθήκη ενός ή περισσότερων κρυφών επιπέδων, το δίκτυο έχει την δυνατότητα να προσεγγίζει συναρτήσεις μεγαλύτερης πολυπλοκότητας. Οι κόμβοι εισόδου στο επίπεδο εισόδου του δικτύου παρέχουν τα στοιχεία των προτύπων εισόδου, με την μορφή διανυσμάτων, που γίνονται εισοδοί στους νευρώνες του δεύτερου επιπέδου, δηλαδή του πρώτου κρυφού επιπέδου. Τα σήματα εξόδου των νευρώνων του δεύτερου επιπέδου, γίνονται σήματα εισόδου στο τρίτο επίπεδο και συνεχίζεται κατά αυτό τον τρόπο η ροή των σημάτων μεταξύ των επιπέδων του δικτύου μέχρι να φτάσουν στο επίπεδο εξόδου. Συνήθως, οι νευρώνες σε κάθε επίπεδο του δικτύου, παίρνουν σαν είσοδο, τα σήματα εξόδου από τους νευρώνες του προηγούμενου επιπέδου μόνο. Το σύνολο των σημάτων εξόδου στο επίπεδο εξόδου (τελευταίο επίπεδο του δικτύου), αποτελεί και την απάντηση του δικτύου για τα δεδομένα που εισάγονται στους κόμβους εισόδου.

Εικόνα 8.2: Εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο πολλαπλών επιπέδων

Στην Εικόνα 8.2 παρουσιάζεται η διάταξη ενός πολυεπίεδου προς τα εμπρός τροφοδοτούμενο νευρωνικού δικτύου για την περίπτωση δύο κρυφών επιπέδων. Για συντομία το

δίκτυο στην Εικόνα 8.2 αναφέρεται σε εμάς ως ένα 3-5-3-1 δίκτυο, γιατί έχει τρεις (3) κόμβους πηγής, πέντε (5) και τρεις (3) νευρώνες στο 1ο και στο 2ο κρυφό επίπεδο, αντίστοιχα και ένα (1) νευρώνα εξόδου. Ως ένα άλλο παράδειγμα, ένα τροφοδοτούμενο προς τα εμπρός δίκτυο με m κόμβους πηγής, h_1 νευρώνες στο πρώτο κρυφό επίπεδο, h_2 νευρώνες στο δεύτερο κρυφό επίπεδο και q νευρώνες στο επίπεδο εξόδου αναφέρεται σε μας ως $m-h_1-h_2-q$ δίκτυο.

Επίσης, το νευρωνικό δίκτυο που παρουσιάζεται στην Εικόνα 8.2, ονομάζεται *πλήρως διασυνδεδεμένο* (fully connected), με την έννοια ότι κάθε κόμβος σε κάθε επίπεδο του δικτύου είναι συνδεδεμένος με κάθε κόμβο του επόμενου επιπέδου του δικτύου. Στην περίπτωση που κάποιες από τις συνδέσεις δεν υπάρχουν τότε λέμε ότι το δίκτυο είναι *μερικώς διασυνδεδεμένο* (partially connected).

8.4.3 Ανατροφοδοτούμενα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Ένα ανατροφοδοτούμενο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (recurrent neural network), το οποίο θα καλούμε εν συντομία ΑΤΝΔ, διαφέρει από ένα νευρωνικό δίκτυο επρόσθιας τροφοδότησης στο γεγονός ότι περιέχει έναν τουλάχιστον βρόγχο ανατροφοδότησης. Αυτό σημαίνει ότι σε έναν τουλάχιστον νευρώνα, το σήμα εξόδου του επηρεάζει το σήμα που έρχεται στην είσοδο του νευρώνα. Για παράδειγμα, ένα ΑΤΝΔ μπορεί να αποτελείται από ένα μόνο επίπεδο νευρώνων όπου κάθε νευρώνας επιστρέφει το σήμα εξόδου του σαν σήμα εισόδου σε όλους τους άλλους νευρώνες του επιπέδου (Εικόνα 8.3). Στη περίπτωση αυτή δεν υπάρχουν κρυφοί νευρώνες ούτε βρόγχοι όπου ένας νευρώνας να επιστρέφει το σήμα εξόδου του σαν είσοδο στον εαυτό του. Ακόμα, στην Εικόνα 8.4 παρουσιάζεται μία άλλη κλάση αναδρομικών νευρωνικών δικτύων που έχουν κρυφούς νευρώνες. Οι αναδρομικές συνδέσεις που φαίνονται στις Εικόνες 8.3 και 8.4, ξεκινάνε τόσο από τους κρυφούς νευρώνες όσο και από τους νευρώνες εξόδου.

Εικόνα 8.3: Ανατροφοδοτούμενο δίκτυο χωρίς βρόγχους αυτοανάδρασης και κρυφούς νευρώνες

Η ύπαρξη αυτή των βρόγχων όπως φαίνονται στις Εικόνες 8.3 και 8.4, επηρεάζουν σημαντικά τις επιδόσεις και την ικανότητα εκπαίδευσης του δικτύου. Επίσης, οι αναδρομικοί

Εικόνα 8.4: Ανατροφοδοτούμενο δίκτυο με κρυφούς νευρώνες τύπου Elman

βρόγχοι περιλαμβάνουν και την χρήση στοιχείων καθυστέρησης (στην Εικόνα 8.4 συμβολίζονται με z^{-1}) έχοντας σαν αποτέλεσμα το δίκτυο να αποκτήσει μία δυναμική μη γραμμική συμπεριφορά.

8.5 Εφαρμογές των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Όλες οι εφαρμογές των νευρωνικών δικτύων έχουν προκύψει τα τελευταία λίγα χρόνια και μερικές από αυτές ήδη βρίσκονται ως έτοιμα προϊόντα στην αγορά και χρησιμοποιούνται ευρέως. Στον ακόλουθο κατάλογο θα παρουσιάσουμε συνοπτικά μερικές από τις βασικές εφαρμογές των τεχνητών νευρωνικών δικτύων σε διάφορους τομείς της επιστήμης και της τεχνολογίας.

1. **Αεροπλοΐα:** Δημιουργία αυτόματων πιλότων και προγραμμάτων προσομοίωσης πτήσης, συστήματα ελέγχου πτήσης, ανίχνευση ελαττωμάτων σε τμήματα αεροπλάνων.
2. **Βιολογία:** Βοήθεια στην κατανόηση του εγκεφάλου και άλλων συστημάτων, δημιουργία μοντέλων αμφιβληστροειδούς χιτώνα και κοχλίας.
3. **Γεωλογία:** Ανάλυση πιθανότητας ύπαρξης πετρελαίου σε γεωλογικούς σχηματισμούς, ανάλυση πετρωμάτων σε ορυχεία, ανάλυση της μόλυνσης του περιβάλλοντος.
4. **Επιχειρήσεις:** Αξιολόγηση υποψηφίων για κάποια θέση, βελτιστοποίηση του συστήματος κράτησης θέσεων σε μεταφορικά μέσα, αναγνώριση γραφικού χαρακτήρα.

5. **Ιατρική:** Ανάλυση ομιλίας για την κατασκευή ακουστικών βοηθημάτων, διάγνωση βασισμένη στα συμπτώματα, έλεγχος χειρουργείου, εξαγωγή συμπερασμάτων από ακτινογραφίες, ανάλυση καρδιογραφημάτων και εγκεφαλογραφημάτων, εντοπισμός καρκίνου σε κολονοσκοπήσεις και μαστογραφίες.
6. **Κατασκευές:** Αυτόματος έλεγχος, έλεγχος γραμμής παραγωγής, έλεγχος ποιότητας, επιλογή τμημάτων κατά το στάδιο της συναρμολόγησης.
7. **Οικονομία:** Υπολογισμός κινδύνου σε δάνεια και υποθήκες αναγνώριση πλαστογραφιών, μετάφραση χειρόγραφων εντύπων, εκτίμηση τιμών μετοχών και συναλλάγματος.
8. **Περιβάλλον:** Πρόγνωση του καπνού, ανάλυση τάσεων και καψικών συνθηκών.
9. **Άμυνα:** Χειρισμός μη επανδρωμένων οχημάτων και αεροπλάνων, αναγνώριση σημάτων από radar, δημιουργία «έξυπνων» όπλων, αναγνώριση και σκόπευση στόχων, βελτιστοποίηση αξιοποίησης αποθεμάτων.

Εκπαίδευση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

9.1 Διαδικασίες Εκπαίδευσης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Η πιο σημαντική ιδιότητα των ΤΝΔ είναι η ικανότητά τους να μαθαίνουν από το περιβάλλον και να βελτιώνουν την απόδοσή τους μέσω της διαδικασίας εκπαίδευσης. Η βελτίωση αυτή πραγματοποιείται στη διάρκεια του χρόνου με κάποιο προκαθορισμένο μέτρο [2, 20, 61, 62].

Ένα ΤΝΔ μαθαίνει από το περιβάλλον του μέσω μίας επαναληπτικής διαδικασίας προσαρμογής των βαρών στις συνάψεις του δικτύου και στα κατώφλια του. Στην ιδανική περίπτωση, μετά από κάθε επανάληψη της διαδικασίας εκπαίδευσης το ΤΝΔ αποκτά περισσότερη γνώση για το περιβάλλον του. Υπάρχουν πάρα πολλές δραστηριότητες που σχετίζονται με την έννοια της εκπαίδευσης έτσι είναι αρκετά δύσκολο να δοθεί ένας ακριβής ορισμός για αυτήν [93]. Επιπλέον, ο ορισμός της εκπαίδευσης είναι θέμα οπτικής γωνίας οπότε ο καθένας μπορεί να την ορίσει διαφορετικά από τους άλλους [98]. Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε τον ορισμό της εκπαίδευσης στο πλαίσιο των νευρωνικών δικτύων, ο οποίος προτάθηκε από τους Mendel και McClaren [92].

Ορισμός 9.1. (Εκπαίδευση ΤΝΔ). Η *εκπαίδευση* (training) είναι μία διαδικασία κατά την οποία οι ελεύθερες παράμετροι ενός νευρωνικού δικτύου προσαρμόζονται μέσω μίας διαδικασίας διέγερσης από το περιβάλλον στο οποίο είναι εμπεδωμένο το δίκτυο. Ο τύπος της εκπαίδευσης καθορίζεται από τον τρόπο με τον οποίο λαμβάνει χώρα η αλλαγή της παραμέτρου.

Ο παραπάνω ορισμός της διαδικασίας εκπαίδευσης, συνεπάγεται την παρακάτω σειρά γεγονότων:

1. Το ΤΝΔ διεγείρεται από το περιβάλλον.
2. Το ΤΝΔ μεταβάλλει τις τιμές των ελεύθερων παραμέτρων του ως αποτέλεσμα των ερεθισμάτων που δέχεται από το περιβάλλον.
3. Το ΤΝΔ αντιδρά με διαφορετικό τρόπο στο περιβάλλον, λόγω των αλλαγών που επήλθαν στην εσωτερική του δομή.

Για την εκπαίδευση των ΤΝΔ, δηλαδή για τον τρόπο με τον οποίο θα μεταβάλλονται οι ελεύθερες παράμετροί του, έτσι ώστε να επιτυγχάνεται η σωστή έξοδος για το ΤΝΔ ανάλογα με τα δεδομένα που εισέρχονται σε αυτό, χρησιμοποιούνται οι αλγόριθμοι εκπαίδευσης.

Ορισμός 9.2. (Αλγόριθμος Εκπαίδευσης ΤΝΔ). *Αλγόριθμος εκπαίδευσης* (training algorithm) ενός ΤΝΔ ονομάζεται ένα προκαθορισμένο σύνολο κανόνων που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του προβλήματος εκπαίδευσης του ΤΝΔ.

Δυστυχώς, δεν υπάρχει ένας μοναδικός αλγόριθμος εκπαίδευσης κατάλληλος για όλες τις περιπτώσεις. Αντίθετα υπάρχει ένα «σύνολο αλγορίθμων» που χρησιμοποιούνται κατά περίπτωση ανάλογα με τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματά τους και το είδος του προβλήματος εκπαίδευσης. Το βασικό σημείο στο οποίο διαφέρουν οι αλγόριθμοι εκπαίδευσης είναι ο τρόπος με τον οποίο προσαρμόζουν τα βάρη w_{kj} των συνάψεων τους.

9.1.1 Εκπαίδευση Διόρθωσης-Σφάλματος

Για να παρουσιάσουμε τον πρώτο κανόνα εκπαίδευσης, ας θεωρήσουμε έναν νευρώνα k , οποίος βρίσκεται στο επίπεδο εξόδου ενός ΤΝΔ, και έστω ότι βρισκόμαστε στην χρονική στιγμή t και $d_k(t)$ είναι η *επιθυμητή απάντηση* ή *απάντηση στόχος* (target response) για το νευρώνα k την χρονική στιγμή t . Έστω ότι η αντίστοιχη πραγματική απάντηση του νευρώνα k παριστάνεται με $o_k(t)$. Η απάντηση $o_k(t)$ προκαλείται από ένα πρότυπο εισόδου $x(t)$, το οποίο εισάγεται στο επίπεδο εισόδου του ΤΝΔ, του οποίου στοιχείο είναι ο νευρώνας k . Το πρότυπο $x(t)$ και η επιθυμητή απάντηση $d_k(t)$ για το νευρώνα k αποτελούν ένα συγκεκριμένο παράδειγμα για το ΤΝΔ την χρονική στιγμή t . Υποθέτουμε ότι αυτό το παράδειγμα καθώς και όλα τα υπόλοιπα παραδείγματα που δίνονται στο δίκτυο, παράγονται από ένα πιθανοτικό περιβάλλον χωρίς όμως να είναι γνωστή η κατανομή που έχουν τα στοιχεία του. Στην πράξη, συνήθως, η πραγματική απάντηση $o_k(t)$ του νευρώνα k είναι διαφορετική από την απάντηση στόχο $d_k(t)$. Έτσι μπορούμε να ορίσουμε ένα σήμα σφάλματος ως τη διαφορά μεταξύ της επιθυμητής απάντησης $d_k(t)$ και της πραγματικής απάντησης $o_k(t)$ του νευρώνα k , δηλαδή

$$e_k(t) = d_k(t) - o_k(t).$$

Ο τελικός στόχος της *εκπαίδευσης με διόρθωση σφάλματος* (error correction learning) είναι η ελαχιστοποίηση μίας *συνάρτησης κόστους* (cost function) που βασίζεται στο σφάλμα $e_k(t)$, έτσι ώστε η πραγματική απάντηση κάθε νευρώνα στο δίκτυο να πλησιάζει την επιθυμητή απάντηση για το νευρώνα κατά μία στατιστική έννοια [117]. Ένα κριτήριο που χρησιμοποιείται συχνά σαν συνάρτηση κόστους είναι το κριτήριο του *μέσου τετραγωνικού σφάλματος*, (mean square error) που ορίζεται σαν η μέση τετραγωνική τιμή του αθροίσματος του τετραγώνου των σφαλμάτων, δηλαδή

$$J = E \left[\frac{1}{2} \sum_k e_k^2(t) \right] \quad (9.1)$$

το οποίο είναι το άθροισμα των σφαλμάτων των νευρώνων εξόδου του ΤΝΔ. Η ελαχιστοποίηση της (9.1) ως προς τις παραμέτρους του δικτύου οδηγεί στην μέθοδο gradient descent [61]. Στην πράξη δεν είναι δυνατόν να βρεθεί η ακριβής λύση του προβλήματος βελτιστοποίησης

με αυτή την μέθοδο και επομένως περιοριζόμαστε στην εύρεση μίας προσεγγιστικής λύσης. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούμε την στιγμιαία τιμή του αθροίσματος των τετραγωνικών σφαλμάτων ως κριτήριο, δηλαδή

$$E(t) = \frac{1}{2} \sum_k e_k^2(t).$$

Σε αυτή την περίπτωση το δίκτυο βελτιστοποιείται ελαχιστοποιώντας την $E(t)$ ως προς τα βάρη των συνάψεων του δικτύου. Έτσι, σύμφωνα με τον κανόνα εκπαίδευσης με διόρθωση σφάλματος, η προσαρμογή $w_{kj}(t)$ που γίνεται στο βάρος w_{kj} τη χρονική στιγμή t δίνεται από

$$\Delta w_{kj}(t) = \eta e_k(t) x_j(t),$$

όπου η είναι μία θετική σταθερά, η οποία καθορίζει το ρυθμό εκπαίδευσης [129]. Από την εξίσωση αυτή βλέπουμε ότι η προσαρμογή που γίνεται στα βάρη είναι ανάλογη με το σφάλμα και το σήμα εισόδου της σύναψης που είναι το σήμα εξόδου του προσυναπτικού νευρώνα. Γενικά η εκπαίδευση με διόρθωση σφάλματος αποτελεί ένα σύστημα κλειστού βρόγχου. Ως εκ τούτου θα πρέπει η τιμή του ρυθμού εκπαίδευσης η να επιλέγεται έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η σταθερότητα της διαδικασίας. Η σημασία της τιμής του ρυθμού εκπαίδευσης είναι μεγάλη γιατί δεν επηρεάζει μόνο τον ρυθμό σύγκλισης της εκπαίδευσης αλλά και την ίδια την σύγκλιση της διαδικασίας. Αν το η είναι αρκετά μικρό η διαδικασία εκπαίδευσης προχωράει ομαλά αλλά είναι χρονοβόρα και το σύστημα αργεί να συγκλίνει σε μία σταθερή λύση. Από την άλλη πλευρά, αν το η επιλεγεί μεγάλο, ο ρυθμός της εκπαίδευσης θα επιταχύνεται αλλά τότε η διαδικασία εκπαίδευσης μπορεί να αποκλίνει και το σύστημα να γίνει ασταθές. Γι' αυτό το λόγο, έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία διάφορες τεχνικές, οι οποίες αλλάζουν κατάλληλα την τιμή του ρυθμού εκπαίδευσης έτσι ώστε η διαδικασία εκπαίδευσης να συγκλίνει στον επιθυμητό στόχο [18, 70, 77, 88, 108, 109, 126, 127].

9.1.2 Εκπαίδευση με Επίβλεψη

Στην *εκπαίδευση με επίβλεψη* (supervised learning) είναι απαραίτητη η παρουσία ενός εξωτερικού, ως προς το δίκτυο, παράγοντα που μπορούμε να ονομάσουμε «δάσκαλο». Στην Εικόνα 9.1 παρουσιάζεται το πως επιδρά ο δάσκαλος στο δίκτυο και το περιβάλλον κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης. Ο δάσκαλος έχει την απαραίτητη γνώση για το περιβάλλον, που πρακτικά είναι ένα σύνολο από παραδείγματα εισόδου και την αντίστοιχη επιθυμητή έξοδο. Το ΤΝΔ δεν έχει καμία γνώση για το περιβάλλον. Αν υποθέσουμε ότι παρουσιάζουμε στον δάσκαλο και το δίκτυο ένα πρότυπο από το περιβάλλον, τότε λόγω της προηγούμενης γνώσης του δασκάλου για το περιβάλλον, θα είναι σε θέση να παρέχει στο δίκτυο την επιθυμητή απάντηση-έξοδο. Στη συνέχεια, οι παράμετροι του δικτύου προσαρμόζονται ανάλογα με το πρότυπο που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση και το σφάλμα του δικτύου (δηλαδή την διαφορά μεταξύ της επιθυμητής εξόδου και της εξόδου που στην πράξη δίνει το δίκτυο). Η προσαρμογή αυτών των παραμέτρων, γίνεται επαναληπτικά, βήμα προς βήμα με στόχο το δίκτυο να μπορεί να προσομοιώσει τον δάσκαλο. Αν αυτό γίνει εφικτό, τότε μπορούμε να επιτρέψουμε στο δίκτυο να αλληλεπιδράσει με το περιβάλλον χωρίς την παρουσία του δασκάλου.

Εικόνα 9.1: Διάγραμμα ροής εκπαίδευσης με επίβλεψη

9.1.3 Εκπαίδευση χωρίς Επίβλεψη

Στην περίπτωση της *εκπαίδευσης χωρίς επίβλεψη* (unsupervised learning) ή αλλιώς *εκπαίδευσης με αυτο-οργάνωση* (self-organized learning) δεν υπάρχει κάποιος εξωτερικός παράγοντας που επιβλέπει τη διαδικασία εκπαίδευσης. Αυτό σημαίνει ότι δεν υπάρχουν παραδείγματα που πρέπει να μάθει το δίκτυο. Υπάρχει όμως ένα μέτρο, ανεξάρτητο από το εκάστοτε έργο που πρέπει να φέρει εις πέρας το ΤΝΔ, που μετράει την ποιότητα της αναπαράστασης που πρέπει να μάθει το δίκτυο. Οι ελεύθερες παράμετροι του δικτύου βελτιστοποιούνται ως προς αυτό το μέτρο. Όταν το δίκτυο «εκπαιδευτεί» στις στατιστικές ιδιότητες των προτύπων που του δίνονται σαν είσοδος, αναπτύσσει την ικανότητα να δημιουργεί εσωτερικές αναπαραστάσεις για την κωδικοποίηση των χαρακτηριστικών των προτύπων. Αποκτά δηλαδή την ικανότητα να δημιουργεί νέες κλάσεις αυτόματα [15]. Για την εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένας κανόνας ανταγωνιστικής εκπαίδευσης. Για παράδειγμα, ένα ΤΝΔ με δύο επίπεδα, ένα επίπεδο εισόδου και ένα επίπεδο του οποίου οι νευρώνες θα ανταγωνίζονται για το ποιος θα ενεργοποιηθεί ανάλογα με τα χαρακτηριστικά του κάθε προτύπου που δίνεται σαν είσοδος στο ΤΝΔ.

9.2 Εκπαίδευση Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Ένα εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο (ΕΤΝΔ) αποτελείται από ένα σύνολο κόμβων εισόδου που αποτελούν το επίπεδο εισόδου, ένα ή περισσότερα κρυφά επίπεδα που αποτελούνται από νευρώνες που εκτελούν υπολογισμούς και ένα επίπεδο εξόδου που αποτελείται επίσης από νευρώνες που εκτελούν υπολογισμούς. Το σήμα εισόδου (πρότυπο εισόδου) κινείται μέσα στο δίκτυο προς τα εμπρός, δηλαδή από το ένα επίπεδο στο επόμενο του. Τα ΕΤΝΔ συνήθως εκπαιδεύονται χρησιμοποιώντας τους κανόνες εκπαίδευσης με επίβλεψη. Ένας αλγόριθμος που χρησιμοποιείται πολύ συχνά για τον σκοπό αυτό είναι γνωστός ως

αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος (backpropagation algorithm) και βασίζεται στον κανόνα εκπαίδευσης με διόρθωση σφάλματος. Ο αλγόριθμος αυτός μπορεί να θεωρηθεί σαν γενίκευση του *αλγορίθμου ελαχίστων μέσων τετραγώνων* (least mean square algorithm). Σε αυτό το σημείο θα πρέπει να υπενθυμίσουμε ότι ένα ΕΤΝΔ έχει τρία σαφή χαρακτηριστικά :

1. Το μοντέλο κάθε νευρώνα στο δίκτυο περιλαμβάνει μία μη-γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης (σιγμοειδή ή λογιστική συνάρτηση) στην έξοδό του.
2. Το δίκτυο περιλαμβάνει ένα ή περισσότερα επίπεδα με κρυφούς νευρώνες που δεν αποτελούν μέρος είτε της εισόδου, είτε της εξόδου του δικτύου, οι οποίοι επιτρέπουν στο δίκτυο να «μαθαίνει» και να εκτελεί περίπλοκες εργασίες, εξάγοντας προοδευτικά τα χαρακτηριστικά εκείνα των προτύπων εισόδου που έχουν τη μεγαλύτερη σημασία για την σωστή απάντηση του δικτύου.
3. Το δίκτυο παρουσιάζει υψηλό βαθμό συνδεσιμότητας που καθορίζεται από τις συνάψεις μεταξύ των νευρώνων του δικτύου.

Στην Εικόνα 8.2 παρουσιάζεται η αρχιτεκτονική ενός ΕΤΝΔ δικτύου που έχει δύο κρυφά επίπεδα και είναι πλήρως διασυνδεδεμένο. Υπενθυμίζουμε ότι πλήρως διασυνδεδεμένο ονομάζεται ένα δίκτυο του οποίου κάθε νευρώνας/κόμβος είναι συνδεδεμένος με όλους τους νευρώνες/κόμβους του προηγούμενου επιπέδου. Σε αυτής της μορφής τα δίκτυα το σήμα μεταδίδεται προοδευτικά από αριστερά προς τα δεξιά και από επίπεδο σε επίπεδο. Στο δίκτυο μεταδίδονται δύο ειδών σήματα [104]:

1. *Σήματα συναρτήσεων* (function signals). Ένα σήμα συνάρτησης είναι ένα σήμα εισόδου (ερέθισμα) που ξεκινάει από τους κόμβους εισόδου του δικτύου, διαδίδεται προς τα εμπρός από νευρώνα σε νευρώνα, και καταλήγει στους νευρώνες εξόδου του δικτύου. Σε κάθε νευρώνα του δικτύου από όπου περνάει το σήμα υπολογίζεται σαν συνάρτηση όλων των εισερχόμενων σημάτων και των αντίστοιχων βαρών των συνάψεων που καταλήγουν στο συγκεκριμένο νευρώνα.
2. *Σήματα σφάλματος* (error signals). Ένα σήμα σφάλματος, ξεκινάει από τους νευρώνες εξόδου του δικτύου και διαδίδεται προς τα πίσω από επίπεδο σε επίπεδο. Σε κάθε νευρώνα το σήμα αυτό υπολογίζεται από μία συνάρτηση που εξαρτάται από το σφάλμα.

Υπενθυμίζουμε ότι οι νευρώνες που βρίσκονται στο επίπεδο εξόδου του ΕΤΝΔ, καλούνται νευρώνες εξόδου. Οι κόμβοι που βρίσκονται στο επίπεδο του ΕΤΝΔ από το οποίο ξεκινάει το σήμα ονομάζονται κόμβοι εισόδου. Όλοι οι άλλοι νευρώνες που βρίσκονται στα υπόλοιπα, ενδιάμεσα, επίπεδα του δικτύου λέγονται κρυφοί νευρώνες και τα επίπεδα κρυφά επίπεδα.

Κάθε κρυφός νευρώνας και κάθε νευρώνας εξόδου ενός ΕΤΝΔ έχει σχεδιαστεί για να εκτελεί δύο υπολογισμούς :

1. Να υπολογίζει το σήμα συνάρτησης που εμφανίζεται στην έξοδο του νευρώνα.
2. Να υπολογίζει μία στιγμιαία προσέγγιση του διανύσματος κλίσης κατά την οπίσθια διάδοση του σήματος στο δίκτυο.

9.2.1 Ο Αλγόριθμος Backpropagation

Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιάσουμε τον *αλγόριθμο της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος* (backpropagation algorithm) για την εκπαίδευση ΕΤΝΔ, η οποία περιλαμβάνει τόσο την προς τα εμπρός φάση της εκπαίδευσης όσο και την οπίσθια. Το ΕΤΝΔ που παρουσιάζεται στο επάνω μέρος της Εικόνας 9.2 αντιστοιχεί στην προς τα εμπρός φάση της διαδικασίας και οι συμβολισμοί που χρησιμοποιούνται σε αυτό έχουν ως εξής:

$w^{(l)}$: το διάνυσμα βαρών των συνάψεων ενός νευρώνα στο επίπεδο l .

$\beta^{(l)}$: το κατώφλι ενός νευρώνα στο επίπεδο l .

$u^{(l)}$: το διάνυσμα εσωτερικής δραστηριότητας των νευρώνων στο επίπεδο l .

$o^{(l)}$: το διάνυσμα σημάτων συναρτήσεων των νευρώνων στο επίπεδο l .

Ο δείκτης l κάθε επιπέδου ξεκινάει από το επίπεδο εισόδου ($l = 0$) μέχρι το δίκτυο εξόδου ($l = L$). Στην Εικόνα 9.2 έχουμε $L = 3$ και καλούμε το L βάθος του δικτύου. Το κάτω κομμάτι της Εικόνας 9.2 παρουσιάζει την οπίσθια φάση που αναφέρεται σαν δίκτυο ευαισθησίας και υπολογίζει τις τοπικές κλίσεις στον αλγόριθμο της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος. Οι συμβολισμοί του κάτω τμήματος του σχήματος έχουν ως εξής:

$d^{(l)}$: το διάνυσμα τοπικών κλίσεων των νευρώνων στο επίπεδο l .

e : το διάνυσμα σφάλματος που έχει ως στοιχεία τα $e_1, e_2, \dots, e_q$.

Εικόνα 9.2: Γραφική αναπαράσταση της διαδικασίας του αλγορίθμου της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος

Η διαδικασία που ακολουθεί ο αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος για να εκπαιδεύσει το δίκτυο έχει τα παρακάτω βήματα :

Βήμα 1: *Αρχικοποίηση.* Ανάθεσε σε όλα τα βάρη των συνάψεων και τα κατώφλια των νευρώνων του δικτύου μικρούς τυχαίους αριθμούς από την ομοιόμορφη κατανομή.

Βήμα 2: *Είσοδος των προτύπων για εκπαίδευση.* Δώσε στο δίκτυο για μία επανάληψη τα πρότυπα για την εκπαίδευση. Για κάθε πρότυπο του συνόλου εκτέλεσε την παρακάτω αλληλουχία προς τα εμπρός και προς τα πίσω ενεργειών που περιγράφονται στο Βήμα 3 και Βήμα 4 αντίστοιχα.

Βήμα 3: *Εμπρόσθιοι υπολογισμοί.* Εστω ότι ένα πρότυπο για εκπαίδευση συμβολίζεται με $[x(t), d(t)]$, όπου $x(t)$ είναι το διάνυσμα του προτύπου που εισάγεται στο δίκτυο από το επίπεδο εισόδου και $d(t)$ είναι η επιθυμητή απάντηση από το δίκτυο που δίνεται στους νευρώνες εξόδου του δικτύου. Υπολόγισε τις δυνατότητες ενεργοποίησης και τα σήματα των συναρτήσεων των νευρώνων προχωρώντας προς τα εμπρός στο δίκτυο από επίπεδο σε επίπεδο. Η εσωτερική δραστηριότητα $u_j(t)$ για τον νευρώνα j που βρίσκεται στο επίπεδο l του δικτύου δίνεται από

$$u_j^{(l)}(t) = \sum_{i=0}^{m_0} w_{ji}^{(l)}(t) o_i^{(l-1)}(t) \quad (9.2)$$

όπου $o_i^{(l-1)}(t)$ είναι το σήμα συνάρτησης του νευρώνα i στο προηγούμενο επίπεδο $l - 1$ στην t -οστή επανάληψη και $w_{ji}^{(l)}(t)$ είναι το βάρος της σύναψης που συνδέει τον νευρώνα j του επιπέδου l με το νευρώνα i του επιπέδου $l - 1$. Για $i = 0$ έχουμε $o_0(t) = -1$ και $w_{ji}^{(l)}(t) = \beta_j^{(l)}(t)$, όπου $\beta_j^{(l)}(t)$ είναι η μεροληψία του νευρώνα j που βρίσκεται στο επίπεδο l . Έτσι το σήμα συνάρτησης του νευρώνα j του επιπέδου l θα δίνεται από τον τύπο :

$$o_j^{(l)}(t) = \phi_j(u_j(t))$$

όπου ϕ_j είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης του j νευρώνα. Αν ο νευρώνας j βρίσκεται στο πρώτο κρυφό επίπεδο, δηλαδή $l = 1$, θέσε $o_j^{(0)}(t) = x_j(t)$, όπου $x_j(t)$ είναι το j -οστό στοιχείο του διανύσματος του προτύπου εισόδου (t) . Ενώ, αν ο νευρώνας j βρίσκεται στο επίπεδο εξόδου, δηλαδή $l = L$, θέσε $o_j^{(L)}(t) = o_j(t)$, όπου $o_j(t)$ είναι η έξοδος του δικτύου για το νευρώνα j . Στη συνέχεια υπολόγισε το σήμα σφάλματος

$$e_j(t) = d_j(t) - o_j(t),$$

όπου $d_j(t)$ είναι το j -οστό στοιχείο του διανύσματος της επιθυμητής απάντησης για το δίκτυο $d(t)$.

Βήμα 4: *Οπίσθιοι υπολογισμοί.* Υπολόγισε τις τοπικές κλίσεις δ του δικτύου προχωρώντας προς τα πίσω από επίπεδο σε επίπεδο ως εξής :

$$\delta_j^{(l)}(t) = \begin{cases} e_j^{(L)} \phi_j'(v_j^{(L)}(t)), & \text{για το νευρώνα } j \text{ στο επίπεδο εξόδου } L. \\ \phi_j'(v_j^{(l)}(t)) \sum_k \delta_k^{(l+1)}(t) w_{ji}^{(l+1)}(t), & \text{για το νευρώνα } j \text{ στο κρυφό επίπεδο } l. \end{cases}$$

Στη συνέχεια, προσάρμοσε τα βάρη των συνάψεων του δικτύου στο επίπεδο l σύμφωνα με τον γενικευμένο κανόνα του δέλτα :

$$w_{ji}^{(l)}(t+1) = w_{ji}^{(l)}(t) + m[w_{ji}^{(l)}(t-1)] + \eta \delta_j^{(l)}(t) o_i^{(l-1)}(t), \quad (9.3)$$

όπου η είναι η παράμετρος του ρυθμού εκπαίδευσης και m είναι η σταθερά της ορμής.

Βήμα 5: Επανάληψη. Επανάλαβε τους υπολογισμούς παρουσιάζοντας νέα πρότυπα εκπαίδευσης στο δίκτυο για κάθε επανάληψη μέχρις ότου οι ελεύθερες παράμετροι του δικτύου σταθεροποιηθούν και η συνάρτηση σφάλματος για ολόκληρο το σύνολο προτύπων εκπαίδευσης αποκτήσει την ελάχιστη τιμή της ή μία πολύ μικρή αποδεκτή τιμή. Η σειρά με την οποία θα τροφοδοτούνται τα πρότυπα στο δίκτυο σε κάθε εποχή θα πρέπει να μεταβάλλεται τυχαία.

9.3 Εκπαίδευση Ανατροφοδοτούμενων Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Τα ανατροφοδοτούμενα νευρωνικά δίκτυα (ΑΤΝΔ) χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη χρονοσειρών, δηλαδή για την αναγνώριση ακολουθιών όπου υπάρχει σειριακή συνοχή μεταξύ των στοιχείων. Αυτό συμβαίνει γιατί τα ΑΤΝΔ έχουν *δυναμική μνήμη* (dynamic memory), η οποία οφείλεται στα στρώματα ανατροφοδότησης που περιέχουν.

Η πρώτη πειραματική επίδειξη [61] για την ικανότητα των ΑΤΝΔ έγινε το 1989 πάνω σε συμβολοσειρές, παρουσιάζοντας μάλιστα κάποια ενθαρρυντικά αποτελέσματα. Στη βιβλιογραφία έχουν προταθεί διάφορες αρχιτεκτονικές αναδραστικών νευρωνικών δικτύων παρόλα αυτά σε αυτήν την εργασία θα απασχοληθούμε με τις εξής :

- FFTD: Πρόσθιο νευρωνικό δίκτυο με χρονική καθυστέρηση.
- ERNN: Ανατροφοδοτούμενο νευρωνικό δίκτυο τύπου Elman.
- NARX: Μη γραμμικό ανατροφοδοτούμενο δίκτυο με εξωγενείς εισαγωγές.

Τα ΑΤΝΔ, τα οποία παρουσιάζονται στην Εικόνα 9.3 αποτελούνται από ένα κρυφό στρώμα νευρώνων του οποίου η έξοδος συνδέεται αναδραστικά με τις μονάδες πλαισίου (context units) και ένα επιπλέον στρώμα νευρώνων, το οποίο αποτελείται από μονάδες καθυστέρησης.

Οι μονάδες πλαισίου αποθηκεύουν τις εξόδους των νευρώνων του κρυφού στρώματος για ένα βήμα υπολογισμών του ΑΤΝΔ και στο επόμενο βήμα τις παρουσιάζει σαν επιπλέον εισόδους στο κρυφό στρώμα. Τέλος, το κρυφό στρώμα τροφοδοτεί τους νευρώνες εξόδου. Οι νευρώνες που ανατροφοδοτούν το κρυφό στρώμα δεν είναι απλά μία πιστή καταγραφή της προηγούμενης κατάστασης των εσωτερικών νευρώνων καθώς συνεχίζουν να ανακυκλώνουν πληροφορίες μέσα στο δίκτυο με το πέρασμα του χρόνου.

Περισσότερες πληροφορίες για τους τύπους των ΑΤΝΔ καθώς και για τις εφαρμογές στις οποίες έχουν εφαρμοστεί με επιτυχία μπορούν να βρεθούν στις [2, 20, 57, 61, 83, 89, 149]

Εικόνα 9.3: Τύποι ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων

9.3.1 Ο Αλγόριθμος Backpropagation Through Time

Η μέθοδος εκπαίδευσης των ΑΤΝΔ ονομάζεται *μέθοδος της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος διαμέσου του χρόνου* (backpropagation through time algorithm), η οποία έχει πολλές παραλλαγές, όλες όμως έχουν σαν κεντρική ιδέα το ξεδίπλωμα στον χρόνο του ΑΤΝΔ έτσι ώστε να είναι ισοδύναμο με ένα πολυεπίπεδο δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Στην παρούσα εργασία θα περιγράψουμε τη μέθοδο της *εποχικής εκπαίδευσης* (epochwise training).

Συγκεκριμένα, το στρώμα καθυστέρησης θα πρέπει να θεωρηθεί ως ένα επιπλέον στρώμα εισόδου, έτσι ώστε το ΑΤΝΔ να μπορεί να θεωρηθεί ως ένα δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Αναλυτικότερα, ας θεωρήσουμε ένα ΕΤΝΔ με ένα κρυφό στρώμα (Εικόνα 8.1). Όπως αναφέραμε η λειτουργία του μπορεί να αναπαρασταθεί από τις παρακάτω εξισώσεις

$$\begin{aligned} z &= \phi(W^I x + b^I), \\ o &= \phi(W^II z + b^II), \end{aligned}$$

όπου z και o είναι το διάνυσμα της απάντησης του κρυφού στρώματος και του δικτύου αντίστοιχα, $\phi(\cdot)$ είναι μία μη-γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, W^I και W^II είναι τα διανύσματα των βαρών του κρυφού στρώματος και του στρώματος εξόδου, αντίστοιχα, x είναι το διάνυσμα εισόδου και b^I και b^II είναι τα διανύσματα της αμεροληψίας του κρυφού στρώματος και του στρώματος εξόδου, αντίστοιχα.

Με βάση του παραπάνω συμβολισμού, η λειτουργία ενός δικτύου FSTD μπορεί να αναπαρασταθεί από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\begin{aligned} s(t) &= \{x(t) \times x(t+1) \times \dots \times x(t-n_d)\} \\ z(t) &= \phi(W^I s(t) + b^I) \\ o(t) &= \phi(W^{II} z + b^{II}) \end{aligned}$$

όπου $s(t)$ είναι το διάνυσμα κατάστασης στην χρονική στιγμή t , $\times$ είναι το Καρτεσιανό γινόμενο και n_d είναι ο αριθμός των εισόδων καθυστέρησης. Προσθέτοντας μία σύνδεση ανατροφοδότηση από το κρυφό στρώμα στις μονάδες καθυστέρησης τότε μπορούμε να ορίσουμε τη λειτουργία ενός δικτύου ERNN δικτύου ως εξής:

$$\begin{aligned} s(t) &= \{x(t) \times x(t+1) \times \dots \times x(t-n_d)\} \\ z(t) &= \phi(Ds(t-1) + W^I x(t) + b^I) \\ o(t) &= \phi(W^{II} z + b^{II}) \end{aligned}$$

όπου D είναι ένας διαγώνιος πίνακας. Τέλος, η λειτουργία ενός δικτύου NARX μπορεί να αναπαρασταθεί από τις εξισώσεις:

$$\begin{aligned} s(t) &= \{x(t) \times x(t+1) \times \dots \times x(t-n_d+1)\} \times \dots \times \\ &\quad \{o(t-1) \times o(t-2) \times \dots o(t-m)\} \\ z(t) &= \phi(Ds(t-1) + W^I x(t) + b^I) \\ o(t) &= \phi(W^{II} z + b^{II}) \end{aligned}$$

όπου m είναι ο αριθμός των εξόδων ανατροφοδότησης.

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω εξισώσεις ένα ATND (οποιασδήποτε αρχιτεκτονικής) μπορεί να ξεδιπλωθεί στο χρόνο αυθαίρετα έτσι ώστε να έχει μνήμη που φτάνει μακρύτερα πίσω στον χρόνο. Στο ισοδύναμο δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης μπορούμε να εφαρμόσουμε τον αλγόριθμο της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος για την εκπαίδευσή του. Η παραπάνω διαδικασία μπορεί εύκολα να γενικευτεί για την εκπαίδευση ATND με περισσότερα του ενός κρυφά στρώματα [61, 89].

Η αντιστοίχιση του κλασικού αλγορίθμου της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος ολοκληρώνεται αν θεωρήσουμε σαν εποχή εκπαίδευσης το σύνολο της χρονοσειράς στην οποία εκπαιδεύεται το δίκτυο. Το δίκτυο δηλαδή χρειάζεται τόσες εποχές για να εκπαιδευτεί όσες είναι και οι φορές που πρέπει να περάσει η χρονοσειρά για τη διόρθωση των βαρών του.

Το ξεδίπλωμα, όμως στον χρόνο του δικτύου από ένα σημείο και έπειτα μπορεί να επιφέρει αποτελέσματα που επηρεάζουν αρνητικά την ικανότητα του δικτύου να μαθαίνει. Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται *φαινόμενο της εξαφανιζόμενης κλίσης* (vanishing gradient) [17] και συμβαίνει μιας και όλο και περισσότερες παράμετροι συνεισφέρουν στο άθροισμα της διόρθωσης των βαρών με αποτέλεσμα να γίνεται δυσκολότερη η διαδικασία της εκπαίδευσης.

Μέρος V

**Νέες Μέθοδοι Εκπαίδευσης
Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων**

Μεθόδος DSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Όπως αναφέραμε στα προηγούμενα κεφάλαια, ένα βασικό μειονέκτημα των μεθόδων συζυγών κλίσεων για την εκπαίδευση ΤΝΔ είναι η αδυναμία εξασφάλισης δημιουργίας κατευθύνσεων μείωσης με αποτέλεσμα την εφαρμογή επανεκκινήσεων για την εξασφάλιση της σύγκλισης. Εντούτοις, υπάρχει μια ανησυχία όσον αφορά τις μεθόδους, οι οποίες χρησιμοποιούν επανεκκινήσεις. Συγκεκριμένα αν οι επανεκκινήσεις προκαλούνται πολύ συχνά τότε υπάρχει σοβαρός κίνδυνος υποβιβασμού της αποδοτικότητας της μεθόδου [101]. Δηλαδή, στην περίπτωση όπου η μέθοδος επανεκκινεί, μια τέτοια επιλογή δεν θα είναι απαραίτητα αποτελεσματική για την αποδοτικότητα της μεθόδου μιας που η τελευταία υποβιβάζεται στη κλασική μέθοδο της οπίσθιας διάδοσης του σφάλματος, η οποία έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα ανεπαρκής για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων [53]. Ως εκ τούτου, δεν είναι σοφό να επανεκκινηθεί η μέθοδος εγκαταλείποντας όλες τις πληροφορίες δεύτερης τάξης για τη συνάρτηση σφάλματος [113]. Γ' αυτό το λόγο σε αυτό και στα επόμενα τρία κεφάλαια θα αναπτύξουμε μέθοδο εκπαίδευσης συζυγών κλίσεων οι οποίες:

1. Εξασφαλίζουν τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης έτσι ώστε να αποφεύγονται οι συχνές επανεκκινήσεις.
2. Οι νέες μέθοδοι θα έχουν ισχυρές ιδιότητες σύγκλισης.
3. Η απόδοση των νέων μεθόδων θα είναι ανώτερη από αυτήν των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων.

10.1 Εισαγωγή

Οι Hager και Zhang [58, 59] πρότειναν μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία ονομάζεται CG-Descent και ικανοποιεί την επαρκή συνθήκη μείωσης (4.2) χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε γραμμική αναζήτηση. Συγκεκριμένα, η μέθοδος τους μπορεί να θεωρηθεί σαν μια τροποποίηση του τύπου των Hestenes-Stiefel (4.5) προσθέτοντας τον όρο $-\mu g_k^T d_{k-1}$, όπου $\mu = 2\|y_{k-1}\|^2 / (y_{k-1}^T d_{k-1})^2$, δηλαδή

$$\beta_k^N = \beta_k^{HS} - 2 \frac{\|y_{k-1}\|^2}{(d_{k-1}^T y_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}.$$

Μία πολύ σημαντική ιδιότητα της μεθόδου CG-Descent είναι ότι ικανοποιεί την εξίσωση $g_k^T d_k = -\frac{7}{8}\|g_k\|^2$, ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Τέλος, για την εξασφάλιση της ολικής σύγκλισης της μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις πρότειναν το παρακάτω τροποποιημένο σχήμα

$$\beta_k^{\text{HZ}} = \max\{\beta_k^{\text{N}}, \xi_k\}, \quad \text{όπου} \quad \xi_k = -\frac{1}{\|d_k\|^2 \min\{\|g_k\|, \xi\}},$$

όπου $\xi > 0$ είναι μία θετική σταθερά.

Επηρεασμένοι, από τα θεωρητικά και πρακτικά πλεονεκτήματα της μεθόδου CG-Descent και της υπολογιστικής αποτελεσματικότητας των φασματικών μεθόδων συζυγών κλίσεων [18], οι Yu et al. [135] παρουσίασαν μία νέα μέθοδο φασματικών συζυγών κλίσεων, η οποία εγγυάται τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε γραμμική αναζήτηση. Συγκεκριμένα, η μέθοδος που πρότειναν ονομάζεται Descent Spectral Perry (DSP) και αποτελεί παραλλαγή της φασματικής μεθόδου του Perry, όπου η παράμετρος ενημέρωσης δίνεται από το παρακάτω τύπο.

Ορισμός 10.1. (Παράμετρος Ενημέρωσης της Μεθόδου Descent Spectral Perry).

$$\beta_k^{\text{DSP}} = \beta_k^{\text{SP}} - \frac{C\|y_{k-1} - s_{k-1}\|^2}{\delta_k(y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}, \quad (10.1)$$

όπου $C > 1/4$ είναι μία παράμετρος.

Ουσιαστικά, η παράμετρος C ουσιαστικά ρυθμίζει το σχετικό βάρος μεταξύ της συζυγίας και της μείωσης και στην περίπτωση όπου $C > 1/4$ και $\delta_k > 0$ τότε ικανοποιείται η επαρκής συνθήκη μείωσης (4.2) ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης, δηλαδή

$$g_k^T d_k \leq -\left(1 - \frac{1}{4C}\right) \frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2.$$

Επιπλέον, η μέθοδος συγκλίνει ολικά για ισχυρά κυρτές συναρτήσεις αν η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe [135]. Ένα πολύ σημαντικό θεωρητικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου μπορεί να φανεί από το παρακάτω λήμμα.

Λήμμα 10.1. [135]. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τη μέθοδο συζυγών κλίσεων (3.1), (4.18) και (10.1) και η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5) και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε} \quad k \geq 0,$$

τότε υπάρχουν σταθερές $b > 1$ και $\lambda > 0$ τέτοιες ώστε

$$|\beta_k^{\text{DSP}}| \leq b$$

και

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \quad \Rightarrow \quad |\beta_k^{\text{DSP}}| \leq \frac{1}{b}.$$

Το Λήμμα 10.1 παρουσιάζει ότι η τιμή της παραμέτρου β_k^{DSP} θα είναι μικρή όταν το βήμα s_{k-1} θα είναι μικρό, το οποίο σημαίνει ότι η μέθοδος ουσιαστικά εκτελεί επανεκκίνηση στην περίπτωση όπου το βήμα είναι πάρα πολύ μικρό. Αυτή η ιδιότητα της μεθόδου είναι παρόμοια με την Ιδιότητα(*) των Gilbert και Nocedal [50]. Με άλλα λόγια, η μέθοδος DSP αποφεύγει την εμφάνιση του *φαινόμενου του φρακαρίσματος* [113], το οποίο εμφανίζεται στη μέθοδο FR και είναι πάρα πολύ σημαντικό για την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου [134, 135].

Τέλος, οι Yu et al. [135] παρουσίασαν κάποια ενθαρρυντικά αποτελέσματα στην περίπτωση όπου η παράμετρος δ_k είναι η φασματική παράμετρος των Barzilai και Borwein [14], δηλαδή

$$\delta_k = \frac{y_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T s_{k-1}}. \quad (10.2)$$

10.2 Αλγόριθμος DSP-CG

Επηρεασμένοι από τα θεωρητικά πλεονεκτήματα και την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της νέας φασματικής μεθόδου συζυγών κλίσεων εφαρμόσαμε τη μέθοδο DSP για την εκπαίδευση τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στις εργασίες [78, 83]. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο Descent Spectral Perry Conjugate Gradient Algorithm (DSP-CG) για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων.

Αλγόριθμος 10.1 Αλγόριθμος DSP-CG

Βήμα 1: Δοθέντων w_0 , $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, k_{MAX} , E_G και $\epsilon \rightarrow 0$; Θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την τιμή της συνάρτησης σφάλματος E_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $E_k < E_G$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση πέτυχε".

Βήμα 4: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε".

Βήμα 5: Υπολόγισε την κατεύθυνση αναζήτησης d_k ,

$$d_k = -\frac{1}{\delta_k} g_k + \beta_k^{\text{DSP}} d_{k-1}.$$

Βήμα 6: Βρες ένα ρυθμό εκπαίδευσης η_k , ο οποίος να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe,

$$E(w_k + \alpha_k d_k) - E(w_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (10.3)$$

$$g(w_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 |g_k^T d_k|. \quad (10.4)$$

Βήμα 7: Ενημέρωσε τα βάρη

$$w_{k+1} = w_k + \eta_k d_k.$$

και θέσε $k = k + 1$.

Βήμα 8: Αν $k > k_{\text{MAX}}$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε" αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

Σημείωση: Στα αριθμητικά μας αποτελέσματα η παράμετρος δ_k υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη φασματική παράμετρος των Barzilai και Borwein [14]. Αξίζει να επισημάνουμε ότι η συνθήκη Wolfe (11.8) εγγυάται ότι $y_{k-1}^T d_{k-1} > 0$, το οποίο συνεπάγεται ότι η φασματική παράμετρος δ_k θα είναι πάντα θετική.

Επισημαίνουμε ότι το πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου συγκριτικά με τις υπόλοιπες μεθόδους εκπαίδευσης συζυγών κλίσεων είναι ότι εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης, αποφεύγοντας τον κίνδυνο του υποβιβασμού της αποδοτικότητάς της από τις συχνές επαννεκινήσεις.

Παρόλα αυτά, το μειονέκτημα της μεθόδου DSP-CG είναι η μη εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις, το οποίο συνεπάγεται ότι υπάρχει πιθανότητα οι επαναλήψεις να συνεχίζονται επ' άπειρον χωρίς να παρουσιάζεται ουσιαστική πρόοδος [114]. Γι' αυτό το λόγο, στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε δύο παραλλαγές της μεθόδου, οι οποίες εγγυώνται ολική σύγκλιση για μη κυρτές συναρτήσεις.

10.2.1 Παραλλαγές του Αλγορίθμου DSP

Για τη δημιουργία μεθόδων συζυγών κλίσεων, οι οποίες θα συγκλίνουν ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις, οι Gilbert και Nocedal πρότειναν τον *περιορισμό* (truncation) της παραμέτρου ενημέρωσης έτσι ώστε να είναι μη αρνητική [50]. Οι Dai et al. [29, 31] μελέτησαν περαιτέρω την ιδέα των Gilbert και Nocedal και κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι ο περιορισμός της παραμέτρου ενημέρωσης είναι απαραίτητος για την εξασφάλιση της ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις.

Παρόλα αυτά, αυτός ο περιορισμός της παραμέτρου μπορεί ίσως να έχει μη επιθυμητά αποτελέσματα όσον αφορά τη ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου. Γι' αυτό το λόγο, οι Yu et al. [135] πρότειναν δύο τροποποιήσεις της παραμέτρου β_k^{DSP} , έτσι ώστε το κάτω φράγμα της παραμέτρου να μεταβάλλεται σε κάθε επανάληψη. Η πρώτη τροποποίηση, ορίζεται ως εξής:

$$\beta_k^{\text{DSP}_1^+} = \max\{\beta_k^{\text{DSP}}, \rho_k\}, \quad \text{όπου} \quad \rho_k = -\frac{C\|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta(y_{k-1}^T d_{k-1})^2} |g_k^T s_{k-1}|,$$

ενώ η δεύτερη βασίζεται στο σχήμα που παρουσιάστηκε από τους Hager και Zhang [58], δηλαδή

$$\beta_k^{\text{DSP}_2^+} = \max\{\beta_k^{\text{DSP}}, \xi_k\}, \quad \text{όπου} \quad \xi_k = -\frac{1}{\delta_k \|d_{k-1}\| \min\{\xi, \|g_{k-1}\|\}},$$

όπου ξ είναι μια θετική σταθερά. Όσον αφορά το δεύτερο σχήμα αξίζει να επισημάνουμε ότι όταν το $\|g_{k-1}\|$ τίνει στο μηδέν καθώς το k μεγαλώνει και η ακολουθία $\{\|d_{k-1}\|\}$ είναι φραγμένη, το ξ_k τίνει στο $-\infty$. Σε αυτήν την περίπτωση ο τύπος $\beta_k^{\text{DSP}_2^+}$ θα υποβαθμιστεί στον τύπο β_k^{DSP} [58, 135]. Προφανώς οι ποσότητες ρ_k και ξ_k είναι μη θετικές, το οποίο συνεπάγεται ότι

$$\beta_k^{\text{DSP}_1^+} \in [\beta_k^{\text{DSP}}, \max\{\beta_k^{\text{DSP}}, 0\}].$$

Στη συνέχεια του κεφαλαίου στην περίπτωση όπου στον Αλγόριθμο DSP-CG αντικαταστήσουμε την παράμετρο β_k^{DSP} με την $\beta_k^{\text{DSP}_1^+}$ ή την $\beta_k^{\text{DSP}_2^+}$ τότε θα τον αποκαλούμε Αλγόριθμο DSP_1^+ -CG ή Αλγόριθμο DSP_2^+ -CG, αντίστοιχα. Για τις δύο τροποποιήσεις του αλγορίθμου DSP-CG παρουσιάζουμε το θεώρημα ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις.

Θεώρημα 10.1. [135]. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω η ακολουθία των βαρών $\{w_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο DSP_1^+ -CG ή από τον Αλγόριθμο DSP_2^+ -CG τότε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

10.3 Αποτίμηση του Αλγόριθμου DSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτή την ενότητα, θα αξιολογήσουμε την απόδοση των αλγορίθμων DSP-CG, DSP_1^+ -CG και DSP_2^+ -CG για την εκπαίδευση πρόσθιων και ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων.

Οι παράμετροι των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν σε όλες τις προσομοιώσεις είναι $\sigma_1 = 10^{-4}$, $\sigma_2 = 0.5$, $C = 0.5$ και $\xi = 0.01$ [135]. Τα νευρωνικά δίκτυα σε κάθε προσομοίωση αρχικοποιήθηκαν με τα ίδια αρχικά βάρη χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των Nguyen-Widrow [99] και έλαβαν την ίδια ακολουθία προτύπων εισόδου. Για την αξιολόγηση των εκπαιδευόμενων δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση k -σημείων (k -fold cross validation) [69], η οποία αποτελεί την δημοφιλέστερη διαδικασία αξιολόγησης. Επίσης, για την αξιολόγηση των μεθόδων χρησιμοποιήσαμε τα προφίλ απόδοσης των Dolan και Moré [38] ως προς το υπολογιστικό κόστος (συναρτησιακούς υπολογισμούς/υπολογισμούς των κλίσεων) και ως προς τον υπολογιστικό χρόνο. Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής Pentium 2.4MHz με 512MB RAM και το πρόγραμμα Matlab 6.5 και η υλοποίηση των παραπάνω μεθόδων πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του πακέτου Matlab Neural Network Toolbox. Ο κώδικας βασίζεται στον κώδικα των Birgin και Martínez [18], ο οποίος βρίσκεται στην ιστοσελίδα του Birgin¹. Όλες οι μέθοδοι εκπαίδευσης υλοποιήθηκαν με την γραμμική αναζήτηση, η οποία προτάθηκε στο CONMIN από τους Shanno και Phua [119]. Συνοπτικά, στα παρακάτω προφίλ απόδοσης, οι συμβολισμοί έχουν τις εξής έννοιες:

- «SP» αντιστοιχεί στη φασματική μέθοδος συζυγών κλίσεων του Perry [18].
- «DSP» αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο DSP-CG.
- « DSP_1^+ » αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο DSP_1^+ -CG.
- « DSP_2^+ » αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο DSP_2^+ -CG.

10.3.1 Αποτίμηση του Αλγόριθμου DSP-CG για την Εκπαίδευση Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτό την ενότητα, θα αξιολογήσουμε την απόδοση των μεθόδων συζυγών κλίσεων για την εκπαίδευση εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικών δικτύων σε πέντε προβλήματα κατηγοριοποίησης από τη βάση δεδομένων μηχανικής μάθησης UCI [97]: το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας, το πρόβλημα Fisher's iris, το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία, το πρόβλημα e.coli, το πρόβλημα yeast.

10.3.1.1 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας

Στην Εικόνα 10.1 απεικονίζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας. Όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης, η μέθοδος DSP υπερτερεί σημαντικά της μεθόδου SP. Επιπλέον, οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ επιδεικνύουν τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι οι καλύτερες μέθοδοι εκπαίδευσης, με τη μέθοδο DSP_2^+ να παρουσιάζει ελάχιστα καλύτερη απόδοση.

¹<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/>

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς τον υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 10.1: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας

10.3.1.2 Το Πρόβλημα Fisher's Iris

Στην Εικόνα 10.2 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα Fisher's iris. Η μέθοδος DSP υπερσχύει σημαντικά έναντι της μεθόδου SP, παρουσιάζοντας καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική. Επίσης, η μέθοδος DSP_2^+ επιδεικνύει την καλύτερη απόδοση υπερτερώντας όλων των υπολοίπων μεθόδων, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς τον υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 10.2: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα iris

10.3.1.3 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία

Η Εικόνα 10.3 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία. Οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ παρουσιάζουν την καλύτερη αποδοτι-

κότητα και δυναμική όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Επίσης, αξίζει να τονίσουμε ότι, η απουσία των επανεκκινήσεων ευθύνεται για την καλύτερη απόδοση των μεθόδων DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ συγκριτικά με τη μέθοδο εκπαίδευσης SP.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς τον υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 10.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα της πισω-τικής έγκρισης στην Αυστραλία

10.3.1.4 Το Πρόβλημα E.coli

Στην Εικόνα 10.4 απεικονίζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα e.coli. Η μέθοδος DSP παρουσιάζει καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική συγκριτικά με τη μέθοδο SP όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Επιπλέον, οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ επιδεικνύουν την καλύτερη απόδοση υπερτερώντας όλων των υπολοίπων μεθόδων, παρουσιάζοντας τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι οι καλύτερες μέθοδοι εκπαίδευσης.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς τον υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 10.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα e.coli

10.3.1.5 Το Πρόβλημα Yeast

Η Εικόνα 10.5 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα yeast. Παρόμοιες παρατηρήσεις μπορούν να γίνουν με τα προηγούμενα προβλήματα όσον αφορά την απόδοση των μεθόδων. Συγκεκριμένα, η μέθοδος DSP υπερτερεί σημαντικά της μεθόδου SP όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Επίσης, οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ καταγράφουν σχεδόν παρόμοια απόδοση και παρουσιάζουν τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι οι καλύτερες μέθοδοι εκπαίδευσης.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς τον υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 10.5: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα yeast

10.3.2 Αποτίμηση του Αλγορίθμου DSP για την Εκπαίδευση Ανατροφοδοτούμενων Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτό την ενότητα, θα αξιολογήσουμε την απόδοση των αλγορίθμων DSP-CG, DSP_1^+ -CG και DSP_2^+ -CG για την εκπαίδευση ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων σε τρία προβλήματα κατηγοριοποίησης από τη βάση δεδομένων μηχανικής μάθησης UCI [97]: το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας, το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία και το πρόβλημα e.coli. Οι τύποι των ανατροφοδοτούμενων δικτύων που χρησιμοποιήσαμε είναι οι εξής:

- FFTD: Εμπρόσθια νευρωνικά δίκτυα με χρονική καθυστέρηση.
- ERNN: Ανατροφοδοτούμενο νευρωνικό δίκτυο τύπου Elman.
- NARX: Μη γραμμικό ανατροφοδοτούμενο δίκτυο με εξωγενείς εισαγωγές.

10.3.2.1 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας

Στην Εικόνα 10.6 απεικονίζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας. Η μέθοδος DSP είναι αρκετά πιο αποδοτική και αποτελεσματική συγκριτικά με τη μέθοδο SP όσον αφορά και τους τρεις τύπους ανατροφοδοτούμενων νευρω-

νικών δικτύων. Επιπλέον οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ παρουσιάζουν την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική, με την DSP_2^+ να επιδεικνύει ελαφρώς καλύτερη απόδοση.

Εικόνα 10.6: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας

10.3.2.2 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία

Η Εικόνα 10.7 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία. Οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ παρουσιάζουν την καλύτερη απόδοση όσον αφορά και τους τρεις τύπους ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων. Οι μέθοδοι DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ κατάφεραν να εκπαιδεύσουν επιτυχώς τα νευρωνικά δίκτυα σε όλες τις προσομοιώσεις σε αντίθεση με τη μέθοδος SP, η οποία κατάφερε να εκπαιδεύσει επιτυχώς μόνο το 79%. Αξίζει να τονίσουμε ότι η φτωχή απόδοση της μεθόδου SP οφείλεται στις συχνές επανεκκινήσεις της μεθόδου.

Εικόνα 10.7: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα της πιστωτικής έγκρισης στην Αυστραλία

10.3.2.3 Το Πρόβλημα E.coli

Η Εικόνα 10.8 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα e.coli. Παρόμοιες παρατηρήσεις μπορούν να γίνουν με τα προηγούμενα προβλήματα όσον αφορά την απόδοση των μεθόδων. Συγκεκριμένα, η μέθοδος DSP επιδεικνύει καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική συγκριτικά με τη μέθοδο SP, όσον αφορά και τους τρεις τύπους ανατροφοδοτούμενων νευρωνικών δικτύων. Επιπλέον οι μέθοδοι DSP_1^+ και DSP_2^+ παρουσιάζουν τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι οι καλύτερες μέθοδοι εκπαίδευσης, με τη μέθοδο DSP_2^+ να επιδεικνύει ελάχιστα καλύτερα αποτελέσματα.

Εικόνα 10.8: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, DSP_1^+ και DSP_2^+ για το πρόβλημα e.coli

10.4 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, αξιολογήσαμε την απόδοση μίας νέας μεθόδου φασματικών συζυγών κλίσεων για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Από την ανάλυση των προφίλ απόδοσης προκύπτει ότι η προτεινόμενη μέθοδος DSP υπερτερεί σημαντικά της μεθόδου SP τόσο σε αποτελεσματικότητα όσο και σε δυναμική, παρέχοντας πιο σταθερή και αποτελεσματική εκπαίδευση. Επιπλέον, εξετάσαμε και την απόδοση δύο παραλλαγών της προτεινόμενης μεθόδου DSP_1^+ και DSP_2^+ , οι οποίες βασίζονται στον περιορισμό του κάτω φράγματος της παραμέτρου ενημέρωσης και συγκλίνουν ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις. Με βάση τα αριθμητικά αποτελέσματα των προσομοιώσεών μας, αξίζει να τονίσουμε ότι ο περιορισμός της παραμέτρου ενημέρωσης δεν έχει μόνο θεωρητικά αλλά και πρακτικά αποτελέσματα.

Μεθόδος MSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα παρουσιάσουμε μία τροποποίηση της φασματικής μεθόδου Perry, η οποία εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Επίσης, αποδεικνύουμε την ολική σύγκλιση της προτεινόμενης μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις, αν η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe (3.4) και (3.5). Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στην εργασία [81].

11.1 Εισαγωγή

Όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, η καθοδική φασματική μέθοδος συζυγών κλίσεων του Perry (DSP-CG), βελτιώνει σημαντικά την αποδοτικότητα της διαδικασίας εκπαίδευσης. Παρόλα αυτά το μειονέκτημα αυτή της μεθόδου είναι η μη εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις, το οποίο συνεπάγεται ότι υπάρχει πιθανότητα οι επαναλήψεις της μεθόδου μπορεί να συνεχίζονται επί άπειρον χωρίς να παρουσιάζεται ουσιαστική πρόοδος [114].

Γι' αυτό το λόγο, επηρεασμένοι από την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της φασματικής μεθόδου συζυγών κλίσεων του Perry [18, 135] και από τις ισχυρές θεωρητικές ιδιότητες των μεθόδων συζυγών κλίσεων, οι οποίες έχουν την ιδιότητα $\beta_k \geq 0$, προτείνουμε μία παραλλαγή της μεθόδου DSP-CG, ως εξής:

$$\beta_k^{\text{MSP}} = \beta_k^{\text{SP}} - \min \left\{ \beta_k^{\text{SP}}, \frac{C \|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta_k (y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1} \right\}, \quad (11.1)$$

όπου $C > 1/4$. Προφανώς, εξ' ορισμού η παράμετρος β_k^{MSP} είναι μη αρνητική. Στη συνέχεια θα δείξουμε ότι οι κατευθύνσεις d_k , οι οποίες παράγονται από τον τύπο

$$d_k = -\frac{1}{\delta_k} g_k + \beta_k^{\text{MSP}} d_{k-1}, \quad (11.2)$$

είναι κατευθύνσεις μείωσης ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης.

Θεώρημα 11.1. Έστω ότι η ακολουθία των κατευθύνσεων αναζήτησης $\{d_k\}$, οι οποίες παράγονται από τις εξισώσεις (11.1) και (11.2), όπου $\delta_k > 0$, τότε η επαρκής συνθήκη μείωσης ισχύει, δηλαδή

$$g_k^T d_k \leq -c \|g_k\|^2, \quad \text{για κάθε } k \geq 0. \quad (11.3)$$

Απόδειξη. Αν $k = 0$, τότε η κατεύθυνση αναζήτησης είναι $d_0 = -g_0$, άρα

$$g_0^T d_0 = -\|g_0\|^2. \quad (11.4)$$

Οπότε η επαρκής συνθήκη μείωσης (11.3) ικανοποιείται για $c = 1$.

Αν $k > 0$, τότε θεωρούμε τις παρακάτω περιπτώσεις:

Περίπτωση 1η: Αν $\beta_k^{\text{SP}} < \frac{C\|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta_k (y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}$. Τότε χρησιμοποιώντας τη σχέση (11.1), έχουμε

$$g_k^T d_k = -\frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2. \quad (11.5)$$

Περίπτωση 2η: Αν $\beta_k^{\text{SP}} > \frac{C\|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta_k (y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1}$. Χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (11.2) και (11.1), έχουμε

$$\begin{aligned} g_k^T d_k &= -\frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2 + \beta_k^{\text{MSP}} g_k^T d_{k-1} \\ &= -\frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2 + \left(\beta_k^{\text{SP}} - \frac{C\|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta_k (y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1} \right) g_k^T d_{k-1} \\ &= -\frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2 + \left(\frac{g_k^T (y_{k-1} - \delta_k s_{k-1})}{\delta_k y_{k-1}^T d_{k-1}} - \frac{C\|y_{k-1} - \delta_k s_{k-1}\|^2}{\delta_k (y_{k-1}^T d_{k-1})^2} g_k^T d_{k-1} \right) g_k^T d_{k-1}. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση με την ανισότητα $u^T v \leq 1/2(\|u\|^2 + \|v\|^2)$, όπου $u = (y_{k-1}^T d_{k-1} / \sqrt{2C}) g_k$ και $v = \sqrt{2C} g_k^T d_{k-1} (y_{k-1} - \delta_k s_{k-1})$, έχουμε

$$g_k^T d_k \leq -\left(1 - \frac{1}{4C}\right) \frac{1}{\delta_k} \|g_k\|^2. \quad (11.6)$$

Επομένως, συνδυάζοντας τις σχέσεις (11.4), (11.5) και (11.6), έχουμε ότι για κάθε $k \geq 0$ οι κατευθύνσεις αναζήτησης d_k , οι οποίες ορίζονται από τις σχέσεις (11.1) και (11.2) ικανοποιούν την επαρκή συνθήκη μείωσης (11.3). Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

11.2 Ο Αλγόριθμος MSP-CG

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο Modified Spectral Perry Conjugate Gradient Algorithm (MSP-CG) για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων.

Αλγόριθμος 11.1 Αλγόριθμος MSP-CG

Βήμα 1: Δοθέντων w_0 , $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, $k_{\max}$, E_G και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την τιμή της συνάρτησης σφάλματος E_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $E_k < E_G$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση πέτυχε".

Βήμα 4: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε".

Βήμα 5: Υπολόγισε την κατεύθυνση αναζήτησης d_k χρησιμοποιώντας τις (11.1) και (11.2).

Βήμα 6: Βρες ένα ρυθμό εκπαίδευσης η_k , ο οποίος να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe

$$E(w_k + \alpha_k d_k) - E(w_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (11.7)$$

$$g(w_k + \alpha_k d_k)^T d_k \geq \sigma_2 |g_k^T d_k|. \quad (11.8)$$

Βήμα 7: Ενημέρωσε τα βάρη

$$w_{k+1} = w_k + \eta_k d_k.$$

και θέσε $k = k + 1$.

Βήμα 8: Αν $k > k_{\max}$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε" αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

Σημείωση: Στα αριθμητικά μας αποτελέσματα η παράμετρος δ_k υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την φασματική παράμετρος των Barzilai και Borwein [14]. Αξίζει να επισημάνουμε ότι σε αυτή την περίπτωση, η συνθήκη Wolfe (11.8) εγγυάται ότι $y_{k-1}^T d_{k-1} > 0$, το οποίο συνεπάγεται ότι $\delta_k > 0$, για κάθε $k > 0$.

11.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MSP-CG

Σε αυτήν την ενότητα, θα παρουσιάσουμε την απόδειξη του Αλγορίθμου MSP-CG για μη κυρτές συναρτήσεις. Γι' αυτό το λόγο, υποθέτουμε ότι η θετική ακολουθία $\{\delta_k\}$ είναι ομοιόμορφα φραγμένη, δηλαδή υπάρχουν $0 < \delta_{\min} < \delta_{\max}$, τέτοια ώστε

$$\delta_{\min} < \delta_k < \delta_{\max}, \quad \text{για κάθε } k > 0. \quad (11.9)$$

Επίσης, αξίζει να υπενθυμίσουμε ότι εφόσον η συνάρτηση σφάλματος E είναι κάτω φραγμένη από το μηδέν, είναι διαφορίσιμη και συνεχής κατά Lipschitz σε όλο το $\mathbb{R}^n$, οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Το παρακάτω λήμμα είναι πάρα πολύ σημαντικό για την απόδειξη της σύγκλισης του Αλγορίθμου MSP-CG και χρησιμοποιείται συχνά στη βιβλιογραφία για την απόδειξη της σύγκλισης των μεθόδων συζυγών κλίσεων [31, 60, 102].

Λήμμα 11.1. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{g_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MSP-CG, τότε η συνθήκη του Zoutendijk

$$\sum_{k \geq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < +\infty, \quad (11.10)$$

ισχύει.

Απόδειξη. Συνδυάζοντας το Θεώρημα 11.1 με τη σχέση (11.7), έχουμε

$$E_{k+1} - E_k \leq \sigma_1 \eta_k g_k^T d_k \leq 0, \quad (11.11)$$

όπου $E_k = E(w_k)$. Γι' αυτό το λόγο η ακολουθία $\{E_k\}$ είναι φθίνουσα και η ακολουθία των βαρών $\{w_k\}$ περιέχεται στο σύνολο $\mathcal{L}$. Επομένως, χρησιμοποιώντας τη σχέση (11.11) με τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2, έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} (E_k - E_{k+1}) < +\infty. \quad (11.12)$$

Χρησιμοποιώντας πάλι το Θεώρημα 11.1 με την συνθήκη Wolfe (11.8) και την Υπόθεση 3.2, αποκομίζουμε

$$-(1 - \sigma_2) g_k^T d_k \leq (g_{k+1} - g_k)^T d_k \leq \|g_{k+1} - g_k\| \|d_k\| \leq \eta_k L \|d_k\|^2.$$

Συνδυάζοντας την παραπάνω σχέση με τη σχέση (11.7), έχουμε

$$\frac{\sigma_1(1 - \sigma_2)}{L} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \leq E_k - E_{k+1},$$

την οποία συνδυάζοντας τη με την σχέση (11.12), έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} \leq \frac{L}{\sigma_1(1 - \sigma_2)} \sum_{k \geq 0} (E_k - E_{k+1}) < +\infty,$$

η οποία ολοκληρώνει την απόδειξη. □

Λήμμα 11.2. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{w_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MSP-CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0, \quad (11.13)$$

τότε $d_k \neq 0$ και

$$\sum_{k > 0} \|u_k - u_{k-1}\|^2 < \infty,$$

όπου $u_k = \frac{d_k}{\|d_k\|}$.

Απόδειξη. Καταρχάς, από το Θεώρημα 11.1 συνεπάγεται ότι $d_k \neq 0$. Επομένως η u_k είναι καλά ορισμένη. Επιπλέον, συνδυάζοντας το Θεώρημα 11.1, το Λήμμα 11.1 και τη σχέση (12.12), έχουμε

$$\sum_{k \geq 0} \frac{1}{\|d_k\|} < +\infty. \quad (11.14)$$

Στη συνέχεια ορίζουμε

$$r_k := \frac{1}{\delta_k} \frac{g_k}{\|d_k\|} \quad \text{και} \quad \theta_k := \beta_k^{\text{MSP}} \frac{\|d_{k-1}\|}{\|d_k\|}, \quad (11.15)$$

Στη συνέχεια, από τον ορισμό της κατεύθυνσης μείωσης (11.2) έχουμε

$$u_k = r_k + \theta_k u_{k-1}. \quad (11.16)$$

Χρησιμοποιώντας αυτή τη σχέση με την ταυτότητα $\|u_k\| = \|u_{k-1}\| = 1$, έχουμε

$$\|r_k\| = \|u_k - \theta_k u_{k-1}\| = \|u_{k-1} - \theta_k u_k\|.$$

Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την συνθήκη $\theta_k \geq 0$ και την τριγωνική ανισότητα, έχουμε

$$\begin{aligned} \|u_k - u_{k-1}\| &\leq \|(1 + \theta_k)u_k - (1 + \theta_k)u_{k-1}\| \\ &\leq \|u_k - \theta_k u_{k-1}\| + \|u_{k-1} - \theta_k u_k\| \\ &= 2\|r_k\|. \end{aligned} \quad (11.17)$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση με τις (3.9), (11.9), (11.14), (11.15) και (11.17), έχουμε

$$\sum_{k>0} \|u_k - u_{k-1}\|^2 \leq 4 \sum_{k>0} \|r_k\|^2 = 4 \sum_{k>0} \frac{1}{\delta_k^2} \frac{\|g_k\|^2}{\|d_k\|^2} \leq \frac{4M^2}{\delta_{\min}} \sum_{k>0} \frac{1}{\|d_k\|^2} < +\infty.$$

Η παραπάνω σχέση ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

Το Λήμμα 11.2 δεν εγγυάται την σύγκλιση της ακολουθίας $\{u_k\}$ αλλά αποδεικνύει ότι οι κατευθύνσεις μείωσης αλλάζουν αργά, ασυμπτωτικά. Προφανώς το παραπάνω λήμμα μπορεί να εφαρμοστεί σε κάθε φασματική μέθοδο συζυγών κλίσεων για την οποία ισχύει η συνθήκη $\beta_k \geq 0$.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε ένα πολύ σημαντικό λήμμα σύμφωνα με το οποίο η παράμετρος β_k^{MSP} θα είναι μικρή όταν το βήμα s_{k-1} θα είναι μικρό.

Λήμμα 11.3. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{w_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MSP-CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0,$$

τότε υπάρχουν σταθερές $b > 1$ και $\lambda > 0$ τέτοιες ώστε

$$|\beta_k^{\text{MSP}}| \leq b \quad (11.18)$$

και

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \quad \Rightarrow \quad |\beta_k^{\text{MSP}}| \leq \frac{1}{b}. \quad (11.19)$$

Απόδειξη. Προφανώς, από τον ορισμό της παραμέτρου ενημέρωσης β_k^{MSP} έχουμε

$$|\beta_k^{\text{MSP}}| \leq |\beta_k^{\text{DSP}}| \quad \text{για κάθε } k > 0.$$

Έτσι χρησιμοποιώντας την παραπάνω ανισότητα με το Λήμμα 10.1 έχουμε ότι οι σχέσεις (11.18) και (11.19) ισχύουν. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

Προφανώς, το παραπάνω λήμμα παρουσιάζει μία πολύ σημαντική ιδιότητα του Αλγορίθμου MSP-CG, η οποία είναι παρόμοια με την Ιδιότητα(*) των Gilbert και Nocedal [50] και είναι εξαιρετικά σημαντική για την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου.

Στη συνέχεια του Κεφαλαίου συμβολίζουμε με Z^+ , το σύνολο των θετικών ακεραίων. Για $\lambda > 0$ και ενός θετικού ακεραίου Δ , ορίζουμε το σύνολο

$$\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda := \{i \in Z^+ \mid k \leq i \leq k + \Delta - 1, \|s_{i-1}\| > \lambda\}.$$

Θεωρούμε ότι ο αριθμός των στοιχείων του $\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda$ συμβολίζεται με $|\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda|$. Ακολουθώντας, παρουσιάζουμε ένα λήμμα για το βήμα s_{k-1} , το οποίο δηλώνει ότι αν οι κλίσεις είναι φραγμένες μακριά από το μηδέν και αν το Λήμμα 11.4 ισχύει τότε ένα συγκεκριμένο κλάσμα βημάτων δεν μπορεί να είναι πολύ μικρό. Το παρακάτω λήμμα είναι ισοδύναμο με το Λήμμα 3.5 στην εργασία [30] και με το Λήμμα 4.2 στην εργασία [50].

Λήμμα 11.4. Έστω ότι όλες οι υποθέσεις του Λήμματος 11.4 ισχύουν. Τότε υπάρχει μία σταθερά $\lambda > 0$ τέτοια ώστε για κάθε $\Delta \in Z^+$ και κάθε δείκτη k_0 υπάρχει ένας δείκτης $k \geq k_0$ τέτοιος ώστε

$$|\mathcal{K}_{k,\Delta}^\lambda| > \frac{\Delta}{2}.$$

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MSP-CG για μη κυρτές συναρτήσεις του οποίου η απόδειξη είναι ακριβώς ίδια με αυτή του Θεωρήματος 3.6 στην εργασία [30] και του Θεωρήματος 4.3 στην εργασία [50].

Θεώρημα 11.2. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι η ακολουθία των βαρών $\{w_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MSP-CG τότε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \inf \|g_k\| = 0.$$

11.4 Επιλογή της Φασματικής Παραμέτρου

Όπως έχουμε αναφέρει η επιλογή της παραμέτρου δ_k στην σχέση (11.2) είναι εξαιρετικά σημαντική για την απόδοση της φασματικής μεθόδου συζυγών κλίσεων. Πιθανότατα, οι πιο

διάσημες επιλογές είναι οι φασματικές παράμετροι των Barzilai και Borwein [14], δηλαδή

$$\delta_k^{\text{BB1}} = \frac{y_{k-1}^T s_{k-1}}{s_{k-1}^T s_{k-1}} \quad \text{και} \quad \delta_k^{\text{BB2}} = \frac{y_{k-1}^T y_{k-1}}{s_{k-1}^T y_{k-1}}. \quad (11.20)$$

Πιο συγκεκριμένα, οι Barzilai και Borwein στην προσπάθεια τους για την επιτάχυνση της μεθόδου της απότομης κλίσης πρότειναν τα παραπάνω μήκη βήματος. Οι παραπάνω φασματικές παράμετροι ελαχιστοποιούν τις ποσότητες $\|\delta s_{k-1} - y_{k-1}\|$ και $\|s_{k-1} - \delta^{-1} y_{k-1}\|$, αντίστοιχα, παρέχοντας μία προσέγγιση δύο σημείων στις εξισώσεις της χορδής $B_k s_{k-1} = y_{k-1}$ και $B_k^{-1} y_{k-1} = s_{k-1}$, οι οποίες είναι θεμελιώδεις για τις μεθόδους Quasi-Newton, όπου B_k είναι η προσέγγιση του Εσσιανού πίνακα. Υπενθυμίζουμε ότι, οι δ_k^{BB1} και δ_k^{BB2} βρίσκονται ανάμεσα στη μικρότερη και τη μεγαλύτερη ιδιοτιμή του μέσου Εσσιανού πίνακα $\int_0^1 \nabla^2 E(w_{k-1} + \delta s_{k-1}) d\delta$, το οποίο συνεπάγεται την άντληση πληροφορίας δεύτερης τάξης χωρίς τον υπολογισμό του Εσσιανού πίνακα. Αξίζει να τονίσουμε ότι η επιλογή δ_k^{BB1} συνήθως επιφέρει καλύτερα αριθμητικά αποτελέσματα από την επιλογή δ_k^{BB2} και έχει προτιμηθεί στη βιβλιογραφία από πολλούς ερευνητές [6, 18, 78, 83, 135]

Πρόσφατα, οι Zhou et al. [145] μελέτησαν περαιτέρω τη μέθοδο των Barzilai και Borwein και πρότειναν ένα δυναμικό και αποτελεσματικό τρόπο για την επιλογή ανάμεσα στις δύο επιλογές, δ_k^{BB1} και δ_k^{BB2} . Συγκεκριμένα πρότειναν το ακόλουθο σχήμα:

$$\delta_k^{\text{NEW}} = \begin{cases} \delta_k^{\text{BB2}}, & \text{αν } \delta_k^{\text{BB1}} / \delta_k^{\text{BB2}} < \kappa; \\ \delta_k^{\text{BB1}}, & \text{διαφορετικά,} \end{cases} \quad (11.21)$$

όπου $\kappa \in (0, 1)$ είναι μία παράμετρος. Χρησιμοποιώντας την ανισότητα του Cauchy έχουμε ότι $\delta_k^{\text{BB2}} \leq \delta_k^{\text{BB1}}$, για κάθε $k > 0$, το οποίο συνεπάγεται ότι σε κάθε επανάληψη το σχήμα (11.21) επιλέγει μεταξύ ενός μεγάλου βήματος δ_k^{BB1} και ενός μικρού βήματος δ_k^{BB2} . Το μικρό βήμα χρησιμοποιείται για τη δημιουργία μίας καλής κατεύθυνσης αναζήτησης στην επόμενη επανάληψη ενώ το μεγάλο βήμα χρησιμοποιείται για μεγάλη μείωση της συναρτησιακής τιμής στην παρούσα επανάληψη [145]. Προφανώς η επιλογή της τιμής της παραμέτρου κ ουσιαστικά ρυθμίζει το πιο από τα δύο βήματα θα χρησιμοποιείται συχνότερα.

11.5 Αποτίμηση του Αλγορίθμου MSP-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτή την ενότητα, θα αξιολογήσουμε την ικανότητα εκπαίδευσης και γενίκευσης του αλγορίθμου MSP-CG σε πέντε προβλήματα κατηγοριοποίησης από τη βάση δεδομένων μηχανικής μάθησης UCI [97]: το πρόβλημα διαβήτη, το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία, το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας, το πρόβλημα yeast και το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar.

Οι παράμετροι των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν σε όλες τις προσομοιώσεις είναι $\sigma_1 = 10^{-4}$, $\sigma_2 = 0.5$, και $C = 0.5$ [135]. Τα νευρωνικά δίκτυα σε κάθε προσομοίωση αρχικοποιήθηκαν με τα ίδια αρχικά βάρη χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των Nguyen-Widrow [99] και έλαβαν την ίδια ακολουθία προτύπων εισόδου. Για την αξιολόγηση των εκπαιδευόμενων

δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση k -σημείων (k -fold cross validation) [69], η οποία αποτελεί την δημοφιλέστερη διαδικασία αξιολόγησης.

Επίσης, για την αξιολόγηση των μεθόδων χρησιμοποιήσαμε τα προφίλ απόδοσης των Dolan και Moré [38] ως προς το υπολογιστικό κόστος (συναρτησιακούς υπολογισμούς/υπολογισμούς των κλίσεων) και ως προς τον υπολογιστικό χρόνο. Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής Pentium 2.4MHz με 512MB RAM και το πρόγραμμα Matlab 6.5 και η υλοποίηση των παραπάνω μεθόδων πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του πακέτου Matlab Neural Network Toolbox. Ο κώδικας βασίζεται στον κώδικα των Birgin και Martínez [18], ο οποίος βρίσκεται στην ιστοσελίδα του Birgin¹. Επίσης, όλες οι μέθοδοι εκπαίδευσης υλοποιήθηκαν με την γραμμική αναζήτηση, η οποία προτάθηκε στο CONMIN από τους Shanno και Phua [119]. Συνοπτικά, στα παρακάτω προφίλ απόδοσης, οι συμβολισμοί έχουν τις εξής έννοιες:

- «SP» αντιστοιχεί στη φασματική μέθοδος συζυγών κλίσεων του Perry [18].
- «DSP» αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο DSP-CG, που παρουσιάσαμε στο Κεφάλαιο 10.
- «MSP» αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MSP_1^+ -CG, ο οποίος χρησιμοποιεί την φασματική παράμετρο δ_k^{BB1} .
- «AMSP» αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MSP_2^+ -CG, ο οποίος χρησιμοποιεί την φασματική παράμετρο δ_k^{NEW} .

11.5.1 Το Πρόβλημα του Διαβήτη

Στην Εικόνα 11.1 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα του διαβήτη. Οι δύο προτεινόμενες μέθοδοι AMSP και MSP υπερτερούν σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης SP και DSP, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Επιπλέον, η μέθοδος AMSP επιδεικνύει την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική. Αξίζει να τονίσουμε ότι η μέθοδος AMSP είναι η μόνη μέθοδος εκπαίδευσης, η οποία παρουσιάζει 100% πιθανότητα επιτυχημένης εκπαίδευσης.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 11.1: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα του διαβήτη

¹<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/>

11.5.2 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών στην Αυστραλία

Στην Εικόνα 11.2 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα της έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Οι δύο προτεινόμενες μέθοδοι AMSP και MSP επιδεικνύουν την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική συγκριτικά με τις μεθόδους SP και DSP. Επιπλέον, η μέθοδος AMSP παρουσιάζει ελαφρώς καλύτερη απόδοση σε σχέση με τη μέθοδο MSP, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 11.2: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα της πιστωτικής έγκρισης στην Αυστραλία

11.5.3 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας

Η Εικόνα 11.3 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Οι μέθοδοι AMSP και MSP υπερτερούν σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης SP και DSP. Πρόσθετα, η μέθοδος

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 11.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας

MSP παρουσιάζει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι η καλύτερη μέθοδος εκπαίδευσης και παρουσιάζει μεγαλύτερη δυναμική από τη μέθοδο AMSP, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης.

11.5.4 Το Πρόβλημα Yeast

Στην Εικόνα 11.4 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας. Η μέθοδος MSP παρουσιάζει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι η καλύτερη μέθοδος εκπαίδευσης, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Επίσης, η μέθοδος AMSP επιδεικνύει καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική συγκριτικά με τις κλασικές μεθόδους εκπαίδευσης SP και DSP.

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 11.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα yeast

11.5.5 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar

(i) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό κόστος.

(ii) Απόδοση ως προς το υπολογιστικό χρόνο.

Εικόνα 11.5: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων SP, DSP, MSP και AMSP για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar

Η Εικόνα 11.5 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Παρόμοιες παρατηρήσεις μπορούν να γίνουν με τα προηγούμενα προβλήματα όσον αφορά την απόδοση των μεθόδων. Η μέθοδος AMSP παρουσιάζει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι η καλύτερη μέθοδος εκπαίδευσης, υπερτερώντας σημαντικά έναντι όλων των υπολοίπων μεθόδων. Επίσης, η μέθοδος MSP επιδεικνύει καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική συγκριτικά με τις κλασικές μεθόδους εκπαίδευσης SP και DSP.

11.6 Αποτίμηση της Ικανότητας Γενίκευσης των Εκπαιδευόμενων Νευρωνικών Δικτύων με τον Αλγόριθμο MSP-CG

Ο Πίνακας 11.1 συνοψίζει τα αποτελέσματα της γενίκευσης των τεχνητών νευρωνικών δικτύων, τα οποία εκπαιδεύτηκαν χρησιμοποιώντας τις μεθόδους SP, DSP, MSP και AMSP. Κάθε γραμμή παρουσιάζει τη μέση απόδοση (%) κάθε μεθόδου για κάθε πρόβλημα. Η καλύτερη απόδοση γενίκευσης για κάθε πρόβλημα κατηγοριοποίησης απεικονίζεται με έντονη γραφή.

Μέθοδοι	Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης				
	Διαβήτη	Έγκρισης Πιστωτικών Καρτών	Καρδιακή Ανεπάρκεια	Yeast	Σημάτα του Sonar
SP	76.2%	85.6%	68.6%	92.5%	75.2%
DSP	76.1%	85.8%	68.5%	92.8%	75.4%
MSP	76.2%	85.8%	68.7%	92.6%	75.4%
AMSP	76.4%	85.9%	68.7%	92.8%	75.6%

Πίνακας 11.1: Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τις μεθόδους SP, DSP, MSP και AMSP

Καταρχάς, παρατηρούμε ότι η μέθοδος AMSP παρουσιάζει τα μεγαλύτερα ποσοστά γενίκευσης για κάθε πρόβλημα κατηγοριοποίησης. Επιπλέον, η μέθοδος MSP καταγράφει πολύ καλά αποτελέσματα, επιδεικνύοντας ίση ή μεγαλύτερη ικανότητα γενίκευσης συγκριτικά με τις κλασικές μεθόδους εκπαίδευσης SP και DSP σε τέσσερα από τα πέντε προβλήματα.

11.7 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάσαμε την απόδοση μίας νέας μεθόδου φασματικών συζυγών κλίσεων για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Η μέθοδος εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις αν η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Με βάση τα αριθμητικά αποτελέσματα διαπιστώνουμε ότι η νέα μέθοδος υπερτερεί σημαντικά των κλασικών μεθόδων

εκπαίδευσης τόσο σε αποδοτικότητα όσο και σε δυναμική, καταλήγοντας στο συμπέρασμα ότι βελτιώνει σημαντικά τη ταχύτητα σύγκλισης της διαδικασίας εκπαίδευσης. Επιπλέον, εξετάσαμε την απόδοση της προτεινόμενης μεθόδου χρησιμοποιώντας μία νέα φασματική παράμετρο, η οποία βελτιώνει σημαντικά την απόδοσης της προτεινόμενης μεθόδου.

Μεθόδος MPR-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα παρουσιάσουμε μία νέα μέθοδος συζυγών κλίσεων για την εκπαίδευση τεχνητών νευρωνικών δικτύων, η οποία αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου PR+ και εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης. Μία πολύ σημαντική ιδιότητα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας την τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας, η οποία προτάθηκε από τους Li et al. [73]. Επίσης, αποδεικνύουμε την ολική σύγκλιση της προτεινόμενης μεθόδου για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στην εργασία [79].

12.1 Εισαγωγή

Καταρχάς, αξίζει να υπενθυμίζουμε ότι για τις Quasi-Newton μεθόδους, μία προσέγγιση B_k του Εσσιανού πίνακα $\nabla^2 E_k$ της συνάρτησης σφάλματος E ικανοποιεί τη κλασική εξίσωση της τέμνουσας

$$B_k s_{k-1} = y_{k-1}. \quad (12.1)$$

Οι Li et al. [73], βασιζόμενοι στις εργασίες [128], πρότειναν μία τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας

$$B_k s_{k-1} = \hat{y}_{k-1}^*, \quad \hat{y}_{k-1}^* = y_{k-1} + \frac{\max\{\hat{\theta}_{k-1}, 0\}}{\|s_{k-1}\|^2} s_{k-1}, \quad (12.2)$$

όπου

$$\hat{\theta}_{k-1} = 2(f_{k-1} - f_k) + (g_k + g_{k-1})^T s_{k-1}, \quad (12.3)$$

η οποία προσεγγίζει με μεγαλύτερη ακρίβεια την επιφάνεια της συνάρτησης σφάλματος E από την κλασική εξίσωση της τέμνουσας (12.1).

Στη βιβλιογραφία, η μέθοδος PR αποτελεί ίσως την πιο αποδοτική μέθοδο εκπαίδευσης συζυγών κλίσεων και έχει εφαρμοστεί σε πολλές εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης [20, 61]. Το κύριο μειονέκτημα της μεθόδου είναι ότι δεν μπορεί να εξασφαλίσει τη δημιουργία κατευθύνσεων μείωσης με αποτέλεσμα οι επανεκκινήσεις να επηρεάζουν την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου [53]. Επίσης, η ολική σύγκλιση της μεθόδου εξασφαλίζεται μόνο αν περιοριστεί η παράμετρος ενημέρωσης σε μη αρνητικές τιμές [29, 31, 50].

Πρόσφατα, ο Yu [134] προτείνει μία τροποποίηση της μεθόδου PR ως εξής

$$\beta_k^{\text{DPR}} = \frac{g_k^T y_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} - C \frac{\|y_{k-1}\|^2}{\|g_{k-1}\|^4} g_k^T d_{k-1}.$$

η οποία εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης, δηλαδή

$$g_k^T d_k \leq - \left(1 - \frac{1}{4C}\right) \|g_k\|^2, \quad (12.4)$$

Επηρεασμένοι από τα θεωρητικά πλεονεκτήματα της τροποποιημένης εξίσωσης της τέμνουσας (12.2), από την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου DPR [134] και από τις ισχυρές ιδιότητες σύγκλισης των μεθόδων συζυγών κλίσεων με την ιδιότητα $\beta_k \geq 0$, προτείνουμε μία παραλλαγή της μεθόδου PR, ως εξής:

$$\beta_k^{\text{MPR}} = \frac{g_k^T \hat{y}_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} - \min \left\{ \frac{g_k^T \hat{y}_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, C \frac{\|\hat{y}_{k-1}\|^2}{\|g_{k-1}\|^4} g_k^T d_{k-1} \right\} \quad (12.5)$$

όπου $C > 1/4$. Πολύ εύκολα, από τις εξισώσεις (4.1) και (12.5) μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι η συνθήκη (12.4) ισχύει ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης.

12.2 Αλγόριθμος MPR-CG

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο Modified Polak-Ribière Conjugate Gradient Algorithm (MPR-CG) για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων.

Αλγόριθμος 12.1 Αλγόριθμος MPR-CG

Βήμα 1: Δοθέντων w_0 , $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$, k_{MAX} , E_G και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την τιμή της συνάρτησης σφάλματος E_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $E_k < E_G$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση πέτυχε".

Βήμα 4: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε".

Βήμα 5: Υπολόγισε την κατεύθυνση αναζήτησης d_k ,

$$d_k = -g_k + \beta_k^{\text{MPR}} d_{k-1}, \quad (12.6)$$

Βήμα 6: Βρες ένα ρυθμό εκπαίδευσης η_k , ο οποίος να ικανοποιεί τις ισχυρές συνθήκες Wolfe

$$E(w_k + \alpha_k d_k) - E(w_k) \leq \sigma_1 \alpha_k g_k^T d_k, \quad (12.7)$$

$$|g(w_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq \sigma_2 |g_k^T d_k| \quad (12.8)$$

Βήμα 7: Ενημέρωσε τα βάρη

$$w_{k+1} = w_k + \eta_k d_k.$$

και θέσε $k = k + 1$.

Βήμα 8: Αν $k > k_{\text{MAX}}$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε" αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

12.3 Σύγκλιση του Αλγορίθμου MPR-CG

Σε αυτήν την ενότητα, θα αποδείξουμε τη σύγκλιση του Αλγορίθμου MPR-CG για μη κυρτές συναρτήσεις. Γι' αυτό το σκοπό, θα χρειαστούμε το παρακάτω λήμμα.

Λήμμα 12.1. [73]. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Τότε για τις ποσότητες θ_k και $\hat{y}_k$, οι οποίες ορίζονται από τις εξισώσεις (12.2) και (12.3), ισχύουν οι συνθήκες

$$|\theta_k| \leq L\|s_k\|^2 \quad \text{και} \quad \|\hat{y}_k\| \leq 2L\|s_k\|.$$

Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε ένα λήμμα σύμφωνα με το οποίο ο Αλγόριθμος επανεκκινεί στη περίπτωση όπου το βήμα s_{k-1} είναι μικρό. Με άλλα λόγια ο αλγόριθμος αποφεύγει την εμφάνιση του *φαινόμενο του φρακαρίσματος* [113], το οποίο εμφανίζεται στη μέθοδο FR. Αυτή η ιδιότητα μοιάζει πάρα πολύ με την Ιδιότητα(*) των Gilbert και Nocedal [50] και είναι εξαιρετικά σημαντική για την υπολογιστική αποτελεσματικότητα της μεθόδου.

Λήμμα 12.2. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{w_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MPR-CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε} \quad k \geq 0,$$

τότε υπάρχουν σταθερές $b > 1$ και $\lambda > 0$ τέτοιες ώστε

$$|\beta_k^{\text{MPR}}| \leq b \tag{12.9}$$

και

$$\|s_{k-1}\| \leq \lambda \quad \Rightarrow \quad |\beta_k^{\text{MPR}}| \leq \frac{1}{b}. \tag{12.10}$$

Απόδειξη. Συνδιάζοντας το Λήμμα 12.1 με τις Υποθέσεις 3.1 και 3.2 και τις σχέσεις (3.9), (12.4) και (12.8) αποκομίζουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $D > 0$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned} |\beta_k^{\text{MPR}}| &= \left| \frac{g_k^T \hat{y}_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2} - \min \left\{ \frac{g_k^T \hat{y}_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, C \frac{\|\hat{y}_{k-1}\|^2}{\|g_{k-1}\|^4} g_k^T d_{k-1} \right\} \right| \\ &\leq \frac{|g_k^T \hat{y}_{k-1}|}{\|g_{k-1}\|^2} + C \frac{\|\hat{y}_{k-1}\|^2}{\|g_{k-1}\|^4} |g_k^T d_{k-1}| \\ &\leq \frac{\|g_k\| \|\hat{y}_{k-1}\|}{\|g_{k-1}\|^2} + C \frac{\|\hat{y}_{k-1}\|^2 \sigma_2 |g_{k-1}^T d_{k-1}|}{\|g_{k-1}\|^4} \\ &\leq \frac{2ML\|s_{k-1}\|}{\|g_{k-1}\|^2} + C \frac{4L^2\|s_{k-1}\|^2}{\|g_{k-1}\|^4} \sigma_2 \left(1 - \frac{1}{4C}\right) \|g_{k-1}\|^2 \\ &\leq \left(\frac{2ML + 4L^2BC\sigma_2(1 - 1/4C)}{\mu^2} \right) \|s_{k-1}\| \triangleq D\|s_{k-1}\|. \end{aligned} \tag{12.11}$$

Ορίζοντας $b := \max\{2, 2DB\}$ και $\lambda := 1/Db$, έχουμε ότι οι σχέσεις (12.9) και (12.10) ισχύουν, το οποίο ολοκληρώνει την απόδειξη. $\square$

Το παρακάτω λήμμα αποδεικνύει ότι οι κατευθύνσεις καθόδου αλλάζουν αργά, ασυμπτωτικά και η απόδειξή του είναι ακριβώς η ίδια με αυτή του Λήμματος 4.1 της εργασίας [50] γι' αυτό και την παραλείπουμε.

Λήμμα 12.3. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι οι ακολουθίες $\{w_k\}$ και $\{d_k\}$ παράγονται από τον Αλγόριθμο MPR-CG και υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0, \quad (12.12)$$

τότε $d_k \neq 0$ και

$$\sum_{k>0} \|u_k - u_{k-1}\|^2 < \infty,$$

όπου $u_k = \frac{d_k}{\|d_k\|}$.

Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου MPR-CG για μη κυρτές συναρτήσεις.

Θεώρημα 12.1. Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες 3.1 και 3.2 ισχύουν. Έστω ότι η ακολουθία των βαρών $\{w_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο MPR-CG τότε

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

Απόδειξη. (Με εις άτοπο επαγωγή). Υποθέτουμε ότι υπάρχει μία θετική σταθερά $\mu > 0$ τέτοια ώστε

$$\|g_k\| \geq \mu, \quad \text{για κάθε } k \geq 0.$$

Η απόδειξη χωρίζεται σε δύο βήματα:

Βήμα 1: Υπολογισμός φράγματος για το βήμα s_k . Έστω Δ ένας θετικός ακέραιος τέτοιος ώστε

$$\Delta \geq 4BD,$$

όπου τα B και D ορίζονται στις (3.9) και (12.11), αντίστοιχα. Τότε για κάθε $l > k \geq k_0$ με $l - k \leq \Delta$ και ακολουθώντας την ίδια απόδειξη όπως η περίπτωση II του Θεωρήματος 3.2 στην εργασία [58], έχουμε

$$\sum_{j=k}^{l-1} \|s_j\| < 2B.$$

Βήμα 2: Υπολογισμός φράγματος για την κατεύθυνση μείωσης d_l . Χρησιμοποιώντας τον ορισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης (12.6) με τις σχέσεις (3.9) και (12.11), έχουμε

$$\|d_l\|^2 \leq \|g_l\|^2 + |\beta_k^{\text{MPR}}|^2 \|d_{l-1}\|^2 \leq M^2 + D^2 \|s_{l-1}\|^2 \|d_{l-1}\|^2.$$

Η υπόλοιπη απόδειξη είναι ακριβώς ίδια με αυτή της περίπτωσης III του Θεωρήματος 3.2 στην εργασία [58], γι' αυτό και την παραλείπουμε. Η απόδειξη ολοκληρώθηκε. $\square$

12.4 Αποτίμηση του Αλγορίθμου MPR-CG για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτή την ενότητα, θα αξιολογήσουμε την εκπαίδευσης και γενίκευσης του αλγορίθμου MPR-CG σε πέντε προβλήματα κατηγοριοποίησης από τη βάση δεδομένων μηχανικής μάθησης UCI [97]: το πρόβλημα του διαβήτη, το πρόβλημα Fisher's iris, το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar, το πρόβλημα yeast και το πρόβλημα e.coli.

Οι παράμετροι των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν σε όλες τις προσομοιώσεις είναι $\sigma_1 = 10^{-4}$ και $\sigma_2 = 0.5$ [78, 135]. Τα νευρωνικά δίκτυα σε κάθε προσομοίωση αρχικοποιήθηκαν με τα ίδια αρχικά βάρη χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των Nguyen-Widrow [99] και έλαβαν την ίδια ακολουθία προτύπων εισόδου. Για την αξιολόγηση των εκπαιδευόμενων δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση k -σημείων (k -fold cross validation) [69], η οποία αποτελεί την δημοφιλέστερη διαδικασία αξιολόγησης. Επίσης, για την αξιολόγηση των μεθόδων χρησιμοποιήσαμε τα προφίλ απόδοσης των Dolan και Moré [38] ως προς το υπολογιστικό κόστος (συναρτησιακούς υπολογισμούς/υπολογισμούς των κλίσεων) και ως προς τον υπολογιστικό χρόνο. Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε ένας υπολογιστής Pentium 2.4MHz με 512MB RAM και το πρόγραμμα Matlab 6.5 και η υλοποίηση των παραπάνω μεθόδων πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του πακέτου Matlab Neural Network Toolbox. Ο κώδικας βασίζεται στον κώδικα των Birgin και Martínez [18], ο οποίος βρίσκεται στην ιστοσελίδα του Birgin¹. Επίσης, όλες οι μέθοδοι εκπαίδευσης υλοποιήθηκαν με την γραμμική αναζήτηση, η οποία προτάθηκε στο CONMIN από τους Shanno και Phua [119]. Συνοπτικά, στα παρακάτω προφίλ απόδοσης, οι συμβολισμοί έχουν τις εξής έννοιες:

- «PR» αντιστοιχεί στη μέθοδο συζυγών κλίσεων Polak-Ribière [110].
- «PR+» αντιστοιχεί στη μέθοδο συζυγών κλίσεων Polak-Ribière⁺ [50].
- «DPR» αντιστοιχεί στη μέθοδο συζυγών κλίσεων Descent Polak-Ribière⁺ [134].
- «MPR» αντιστοιχεί στον Αλγόριθμο MPR-CG.

12.4.1 Το Πρόβλημα του Διαβήτη

Η Εικόνα 12.1 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα του διαβήτη, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Η απόδοση της μεθόδου MPR υπερτερεί σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης PR, PR+ και DPR παρουσιάζοντας την καλύτερη απόδοση. Συγκεκριμένα, η MPR εκπαιδεύει το 52% των προσομοιώσεων με το μικρότερο υπολογιστικό

¹<http://www.ime.usp.br/~egbirgin/>

κόστος και υπολογιστικό χρόνο σε αντίθεση με τις μεθόδους PR, PR+ και DPR, οι οποίες εκπαιδεύουν μόνο το 9%, 16% και 35% αντίστοιχα. Επιπλέον, αξίζει να τονίσουμε ότι οι μέθοδοι MPR και DPR είναι οι μόνες μέθοδοι εκπαίδευσης, οι οποίες παρουσιάζουν 100% πιθανότητα επιτυχημένης εκπαίδευσης.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 12.1: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα του διαβήτη

12.4.2 Το Πρόβλημα Fisher's Iris

Στην Εικόνα 12.2 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα Fisher's Iris. Η μέθοδος MPR παρουσιάζει την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική, υπερτερώντας των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης PR, PR+ και DPR. Επιπλέον, αξίζει να τονίσουμε ότι η MPR είναι η μόνη μέθοδος εκπαίδευσης, η οποία παρουσιάζει 100% πιθανότητα επιτυχημένης εκπαίδευσης.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 12.2: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα iris

12.4.3 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar

Στην Εικόνα 12.3 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar. Επίσης, η μέθοδος MPR παρουσιάζει την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική, υπερτερώντας σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης PR, PR+ και DPR, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 12.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων του sonar

12.4.4 Πρόβλημα E.coli

Η Εικόνα 12.5 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα e.coli. Η μέθοδος MPR παρουσιάζει την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Συγκεκριμένα, η MPR εκπαιδεύει το 64% των νευρωνικών δικτύων με το μικρότερο υπολογιστικό κόστος και υπολογιστικό χρόνο σε αντίθεση με τις κλασικές μεθόδους PR, PR+ και DPR, οι οποίες εκπαιδεύουν μόνο το 10%, 19% και 13% αντίστοιχα.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 12.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα e.coli.

12.4.5 Πρόβλημα Yeast

Στην Εικόνα 12.5 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα yeast, όσον αφορά και τις δύο μετρικές απόδοσης. Παρόμοιες παρατηρήσεις μπορούν να γίνουν με τα προηγούμενα προβλήματα όσον αφορά την απόδοση των μεθόδων. Συγκεκριμένα, οι μέθοδοι MPR και DPR παρουσιάζουν 100% πιθανότητα επιτυχημένης εκπαίδευσης σε αντίθεση με τις μεθόδους PR και PR+, οι οποίες παρουσιάζουν μόνο 0% και 5% πιθανότητα επιτυχημένης εκπαίδευσης, αντίστοιχα. Επίσης, η μέθοδος MPR υπερτερεί σημαντικά της μεθόδου DPR, εκπαιδεύοντας το 91% των νευρωνικών δικτύων με το μικρότερο υπολογιστικό κόστος και υπολογιστικό χρόνο σε αντίθεση με τη μέθοδο DPR, η οποία εκπαιδεύει αντίστοιχα μόνο το 14%.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 12.5: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων PR, PR+, DPR και MPR για το πρόβλημα yeast.

12.5 Αποτίμηση της Ικανότητας Γενίκευσης των Εκπαιδευμένων Νευρωνικών Δικτύων με τον Αλγόριθμο MPR-CG

Μέθοδοι	Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης				
	Fisher's Iris	Διαβήτης	Σημάτα του Sonar	Yeast	E.coli
PR	95.0%	76.1%	75.9%	-	95.8%
PR+	95.3%	76.1%	75.6%	92.0%	96.0%
DPR	97.9%	76.2%	75.3%	92.0%	96.0%
MPR	98.1%	76.4%	75.9%	92.5%	96.0%

Πίνακας 12.1: Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τις μεθόδους PR, PR+, DPR και MPR

Ο Πίνακας 12.1 συνοψίζει τα αποτελέσματα γενίκευσης των τεχνητών νευρωνικών δικτύων, τα οποία εκπαιδεύτηκαν χρησιμοποιώντας τις μεθόδους PR, PR+, DPR και MPR. Κάθε γραμμή παρουσιάζει τη μέση απόδοση (%) κάθε μεθόδου για κάθε πρόβλημα. Η καλύτερη απόδοση γενίκευσης για ένα πρόβλημα κατηγοριοποίησης απεικονίζεται με έντονη γραφή. Από τον Πίνακα 12.1 παρατηρούμε ότι η μέθοδος MPR παρουσιάζει τα μεγαλύτερα ποσοστά γενίκευσης για κάθε πρόβλημα κατηγοριοποίησης υπερτερώντας των κλασικών μεθόδων.

12.6 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, παρουσιάσαμε μία νέα μέθοδο εκπαίδευσης συζυγών κλίσεων, η οποία αποτελεί τροποποίηση της κλασικής μεθόδου PR+. Η μέθοδος εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις ισχυρές συνθήκες Wolfe. Με βάση τα αριθμητικά αποτελέσματα διαπιστώνουμε ότι η προτεινόμενη μέθοδος υπερτερεί σημαντικά των κλασικών μεθόδων και βελτιώνει σημαντικά την αποδοτικότητα της διαδικασίας εκπαίδευσης.

Αλγόριθμος CM-BFGS για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα αναπτύξουμε έναν αλγόριθμο BFGS ελαχίστης μνήμης για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων, ο οποίος βασίζεται σε μία καμπυλόγραμμη αναζήτηση. Η προτεινόμενη μέθοδος είναι συνδυασμός της κλασικής γραμμικής αναζήτησης και της καμπυλόγραμμης αναζήτησης των Moré και Sorensen [95]. Η μέθοδος χρησιμοποιεί την BFGS ενημέρωση ελαχίστης μνήμης για τον υπολογισμό των κατευθύνσεων μείωσης. Σκοπός μας είναι να αντλήσουμε πληροφορία από την ιδιοσύνθεση του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα, αποφεύγοντας οποιαδήποτε αποθήκευση ή παραγοντοποίηση πίνακα. Επιπρόσθετα, να παράγουμε μία κατάλληλη κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας, έτσι ώστε η μέθοδος να μπορεί να εφαρμοστεί για την επίλυση προβλημάτων μεγάλης κλίμακας. Τέλος, αξιολογείται η επίδοση της μεθόδου για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων και σε προβλήματα κατηγοριοποίησης βιοϊατρικών δεδομένων μεγάλης διάστασης. Τα ακόλουθα αποτελούν ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, τα οποία καταγράφονται στις εργασίες [8, 76].

13.1 Το Ζεύγος Κατευθύνσεων Μείωσης

Όπως είδαμε στην Ενότητα 3.3, οι μέθοδοι καμπυλόγραμμης αναζήτησης απαιτούν τον υπολογισμό της πιο αρνητικής ιδιοτιμής και του αντίστοιχου ιδιοδιανύσματος, του Εσσιανού ή του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα. Στην πρόσφατη διεθνή βιβλιογραφία, η έρευνα για την επίλυση προβλημάτων πολλών μεταβλητών, εστιάζεται στη χρήση τόσο της μεθόδου Lanczos, όσο και εσωτερικών επαναληπτικών διαδικασιών, για τον υπολογισμό των ανωτέρω ποσοτήτων. Στόχος μας είναι να αποφύγουμε κάθε εσωτερική επανάληψη ή αποθήκευση πίνακα, έτσι ώστε η μέθοδος να είναι πολύ γρήγορη και ανέξοδη υπολογιστικά, χωρίς όμως να χάνει σε αποδοτικότητα ή αξιοπιστία.

Στην προτεινόμενη μέθοδο καμπυλόγραμμης αναζήτησης, χρησιμοποιούνται δύο κατευθύνσεις μείωσης. Όταν ο πίνακας είναι θετικά ορισμένος, ο αλγόριθμος ακολουθεί μία διαδικασία γραμμικής αναζήτησης. Όταν ο πίνακας είναι μη θετικά ορισμένος, τότε η αναζήτηση του αλγορίθμου είναι καμπυλόγραμμη. Σε αυτή την περίπτωση, χρησιμοποιείται ένα ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης, η Quasi-Newton κατεύθυνση, η οποία υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη BFGS ενημέρωση ελαχίστης μνήμης και η κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας.

Αναλυτικότερα, όπως είδαμε και στην Ενότητα 3.3, το ζεύγος των κατευθύνσεων (p_k, d_k) μείωσης ορίζεται ως εξής:

$$p_{k+1} = \begin{cases} -B_{k+1}^{-1}g_{k+1}, & \text{αν } B_{k+1} > 0; \\ -g_{k+1}, & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (13.1)$$

και

$$d_{k+1} = \begin{cases} 0, & \text{αν } B_{k+1} > 0; \\ -\text{sgn}(u_1^T g_{k+1})u_1, & \text{διαφορετικά.} \end{cases} \quad (13.2)$$

όπου u_1 το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του B_k . Σε αυτό το σημείο αξίζει να υπενθυμίσουμε ότι για το ζεύγος των κατευθύνσεων μείωσης θα πρέπει να ισχύουν οι Συνθήκες 3.1-3.3.

Στην προτεινόμενη μέθοδο και οι δύο κατευθύνσεις παράγονται από την BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης

$$B_{k+1} = \theta_{k+1}I - \theta_{k+1} \frac{s_k s_k^T}{s_k^T s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k}. \quad (13.3)$$

όπου $\theta_{k+1} \in \mathbb{R}^*$. Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε τις δύο κατευθύνσεις μείωσης, δηλαδή την Quasi-Newton κατεύθυνση p_k και την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_k , όπως αυτές προκύπτουν όταν ο προσεγγιστικός Εσσιανός πίνακας είναι ο BFGS πίνακας ελάχιστης μνήμης.

Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε από τη σχέση (13.1), η Quasi-Newton κατεύθυνση p_k υπολογίζεται απευθείας πολλαπλασιάζοντας τον αντίστροφο του πίνακα B_k με την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης g_k . Επειδή ο πίνακας αυτός είναι γνωστός, ο υπολογισμός της συγκεκριμένης κατεύθυνσης γίνεται αρκετά εύκολα. Ενώ, όταν ο B_k είναι μη θετικά ορισμένος, η p_k είναι απλώς η μείον κλίση της συνάρτησης σφάλματος E .

Όσον αφορά την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_k , από τη σχέση (13.2) βλέπουμε ότι απαιτείται ο υπολογισμός του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του πίνακα B_k . Ο υπολογισμός αυτός επιτυγχάνεται εφαρμόζοντας τη μέθοδο εύρεσης ιδιοδιανυσμάτων των ελάχιστης μνήμης Quasi-Newton ενημερώσεων που αναπτύξαμε στην Ενότητα 5.4.

13.2 Η Περίπτωση του Θετικά Ορισμένου Πίνακα

Όταν ο BFGS πίνακας ελάχιστης μνήμης B_{k+1} είναι θετικά ορισμένος, η Quasi-Newton κατεύθυνση υπολογίζεται μέσω του αντιστρόφου του

$$B_{k+1}^{-1} = \frac{1}{\theta_{k+1}}I + \left(1 + \frac{y_k^T y_k}{\theta_{k+1} s_k^T y_k}\right) \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{s_k y_k^T + y_k s_k^T}{\theta_{k+1} s_k^T y_k}, \quad (13.4)$$

όπου ο αρχικός πίνακας B_0^{-1} είναι ένα πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα, της μορφής $B_0^{-1} = 1/\theta_{k+1}I$. Επομένως, αφού

$$p_{k+1} = -B_{k+1}^{-1}g_{k+1}$$

χρησιμοποιώντας τη σχέση (13.4), έχουμε ότι

$$p_{k+1} = -\frac{1}{\theta_{k+1}}g_{k+1} - \left[\left(1 + \frac{y_k y_k^T}{\theta_{k+1} s_k^T y_k} \right) \frac{s_k^T g_{k+1}}{s_k^T y_k} - \frac{y_k^T g_{k+1}}{\theta_{k+1} s_k^T y_k} \right] s_k.$$

Στην περίπτωση όπου τα διανύσματα s_k και y_k είναι γραμμικώς εξαρτημένα (Λήμμα 5.1), δηλαδή ισχύει ότι $y_k = \kappa s_k$ με $\kappa \in \mathbb{R}^*$, τότε ο πίνακας B_{k+1}^{-1} λαμβάνει τη μορφή

$$B_{k+1}^{-1} = \frac{1}{\theta_{k+1}}I - \frac{\kappa - \theta_{k+1}}{\theta_{k+1}\kappa} \frac{s_k s_k^T}{s_k^T s_k}.$$

Επομένως, από τον παραπάνω πίνακα προκύπτει ότι η Quasi-Newton κατεύθυνση είναι της μορφής

$$p_{k+1} = -\frac{1}{\theta_{k+1}}g_{k+1} + \frac{\kappa - \theta_{k+1}}{\theta_{k+1}\kappa} \frac{s_k^T g_{k+1}}{s_k^T s_k} s_k.$$

Συνοψίζοντας τα παραπάνω έχουμε ότι για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης μείωσης p_{k+1} ισχύουν τα εξής:

$$p_{k+1} = \begin{cases} -\frac{1}{\theta_{k+1}}g_{k+1} - \left[\left(1 + \frac{y_k y_k^T}{\theta_{k+1} s_k^T y_k} \right) \frac{s_k^T g_{k+1}}{s_k^T y_k} - \frac{y_k^T g_{k+1}}{\theta_{k+1} s_k^T y_k} \right] s_k, & \text{αν } y_k \neq \kappa s_k; \\ -\frac{1}{\theta_{k+1}}g_{k+1} + \frac{\kappa - \theta_{k+1}}{\theta_{k+1}\kappa} \frac{s_k^T g_{k+1}}{s_k^T s_k} s_k, & \text{αν } y_k = \kappa s_k. \end{cases}$$

όπου $\kappa \in \mathbb{R}^*$. Προφανώς, όταν τα διανύσματα s_k και y_k είναι γραμμικά ανεξάρτητα, απαιτούνται περισσότεροι υπολογισμοί από ότι στην αντίθετη περίπτωση. Περισσότερες πληροφορίες όσον αφορά τα αριθμό των εσωτερικών γινομένων και των πράξεων για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης p_{k+1} μπορούν να βρεθούν στις εργασίες [10, 148].

Όσον αφορά την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_k , η οποία ορίζεται από τη σχέση (13.2), στην περίπτωση του θετικά ορισμένου πίνακα είναι ίση με μηδέν. Συνεπώς, δεν απαιτείται κανένας απολύτως υπολογισμός.

13.3 Η Περίπτωση του Αόριστου Πίνακα

Όταν ο B_{k+1} είναι μη θετικά ορισμένος, η Quasi-Newton κατεύθυνση p_{k+1} ορίζεται ως η μείον κλίση της συνάρτησης σφάλματος E , δηλαδή

$$p_{k+1} = -g_{k+1}.$$

Όμως, για την κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_{k+1} , απαιτείται η εύρεση του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή του πίνακα B_{k+1} . Η διαδικασία της εύρεσης του συγκεκριμένου ιδιοδιανύσματος παρουσιάζεται αναλυτικά στην Ενότητα 5.4. Υπενθυμίζουμε ότι για την εύρεση του συγκεκριμένου ιδιοδιανύσματος διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

1. Η περίπτωση όπου η πιο αρνητική ιδιοτιμή του πίνακα είναι διακριτή.
2. Η περίπτωση όπου η πιο αρνητική ιδιοτιμή του πίνακα είναι πολλαπλή.

Σε αυτό το σημείο υπενθυμίζουμε επίσης ότι με βάση το Λήμμα 5.1 η πρώτη περίπτωση εμφανίζεται όταν τα διανύσματα s_k και y_k είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Αντίθετα η δεύτερη περίπτωση εμφανίζεται όταν τα διανύσματα s_k και y_k είναι συγγραμμικά, δηλαδή της μορφής $y_k = \kappa s_k$ με $\kappa \in \mathbb{R}^*$.

Στην πρώτη περίπτωση, όταν τα διανύσματα s_k και y_k είναι γραμμικά ανεξάρτητα, για να βρούμε το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το Πόρισμα 5.1, σύμφωνα με το οποίο το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην πιο αρνητική ιδιοτιμή λ_1 του B είναι το

$$\hat{u}(\hat{\lambda}) = -\gamma_u(\hat{\lambda}) u + \gamma_{us}(\hat{\lambda}) s_k - \gamma_{uy}(\hat{\lambda}) y_k,$$

όπου οι συντελεστές των διανυσμάτων u , s_k και y_k ορίζονται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \gamma_u(\hat{\lambda}) &= \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1} + \gamma_0(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 \right] / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 \right], \\ \gamma_{us}(\hat{\lambda}) &= \left\{ \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1} \right] s_k^T u + \theta_{k+1} y_k^T u \right\} / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 s_k^T s_k \right], \\ \gamma_{uy}(\hat{\lambda}) &= \left\{ \left[1 - \gamma_1(\hat{\lambda}) \theta_{k+1} + a_k \right] \theta_{k+1} y_k^T u - s_k^T u \right\} / \left[\gamma(\hat{\lambda}) \theta_{k+1}^2 s_k^T y_k \right]. \end{aligned}$$

αντίστοιχα, ενώ οι ποσότητες $\gamma_0(\hat{\lambda})$, $\gamma_1(\hat{\lambda})$ και $\gamma(\hat{\lambda})$ ορίζονται όπως στο Λήμμα 5.2.

Στη δεύτερη περίπτωση όπου η μικρότερη ιδιοτιμή λ_1 του B_{k+1} είναι πολλαπλή, από το Λήμμα 5.1 έχουμε ότι $a_k = 2$ και $B_{k+1} = \theta_{k+1} I$, άρα τα ιδιοδιανύσματα είναι οι στήλες του μοναδιαίου πίνακα. Οπότε, ένα ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη ιδιοτιμή λ_1 είναι το

$$u = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

13.4 Ο Αλγόριθμος CM-BFGS

Για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων προτείνουμε έναν αλγόριθμο, ο οποίος χρησιμοποιεί πληροφορία, η οποία βρίσκεται στον προσεγγιστικό Εσσιανό πίνακα της συνάρτησης σφάλματος E . Ως προσεγγιστικό Εσσιανό της συνάρτησης σφάλματος θεωρούμε τον BFGS πίνακα ελαχίστης μνήμης

$$B_{k+1} = \theta_{k+1} I - \theta_{k+1} \frac{s_k s_k^T}{s_k^T s_k} + \frac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k},$$

όπου $\theta_{k+1} \in \mathbb{R}^*$. Για τον παραπάνω πίνακα κάνουμε την ακόλουθη υπόθεση.

Υπόθεση 13.1. Ας υποθέσουμε ότι B_k είναι οι πίνακες που προκύπτουν από την BFGS ενημέρωση ελαχίστης μνήμης (13.3). Τότε υπάρχει μία θετική σταθερά M , τέτοια ώστε για όλα τα k

$$\|B_k\| \leq M.$$

Ο ακόλουθος αλγόριθμος περιγράφει μία καμπυλόγραμμη αναζήτηση, βασισμένη σε μία διαδικασία Armijo. Το ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης (p_k, d_k) που χρησιμοποιείται, υπολογίζεται όπως αναλύθηκε στις Ενότητες 13.1-13.3. Συγκεκριμένα, ο προτεινόμενος αλγόριθμος εκτελεί μία γραμμική αναζήτηση, όταν ο B_k είναι θετικά ορισμένος ενώ σε αντίθετη περίπτωση, ο αλγόριθμος ακολουθεί την καμπυλόγραμμη αναζήτηση που προτάθηκε από τους Moré και Sorensen [95]. Σε αυτή την καμπυλόγραμμη αναζήτηση, χρησιμοποιείται η κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας d_k . Επομένως, το επαναληπτικό σχήμα είναι της μορφής:

$$w_{k+1} = \begin{cases} w_k + \eta_k p_k, & \text{αν } B_k > 0; \\ w_k + \eta_k^2 p_k + \eta_k d_k, & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

όπου η p_k είναι η Quasi-Newton κατεύθυνση και d_k η κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας.

Αλγόριθμος 13.1 Αλγόριθμος CM-BFGS

Βήμα 1: Δοθέντων w_0 , $0 < c_1, c_2 < 1$, $k_{\max}$, E_G και $\epsilon \rightarrow 0$; θέσε $k = 0$.

Βήμα 2: Υπολόγισε την τιμή της συνάρτησης σφάλματος E_k και την κλίση g_k .

Βήμα 3: Αν $E_k < E_G$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση πέτυχε".

Βήμα 4: Αν $\|g_k\| \leq \epsilon$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε".

Βήμα 5: Υπολόγισε τις ιδιοτιμές λ_i του B_k .

Βήμα 6: Αν $\lambda_1 > 0$ τότε

1. Υπολόγισε την p_k ; θέσε $d_k = 0$.
2. Βρες ένα ρυθμό εκπαίδευσης η_k τέτοιο ώστε να ισχύει

$$E(w_k + \eta_k p_k) \leq E(w_k) + c_1 \eta_k g_k^T p_k.$$

αλλιώς

1. Θέσε $p_k = -g_k$ και υπολόγισε το ιδιοδιάνυσμα u_1 ;
θέσε $d_k = -\text{sgn}(u_1^T g_k) u_1$.
2. Βρες ένα ρυθμό εκπαίδευσης η_k τέτοιο ώστε να ισχύει

$$E(w_k + \eta_k^2 p_k + \eta_k d_k) \leq E(w_k) + c_2 \eta_k (g_k^T d_k + \frac{1}{2} \lambda_1).$$

Βήμα 7: Ενημέρωσε τα βάρη

$$w_{k+1} = \begin{cases} w_k + \eta_k p_k, & \text{αν } \lambda_1 > 0; \\ w_k + \eta_k^2 p_k + \eta_k d_k, & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Βήμα 8: Αν $k > k_{\max}$ τότε επέστρεψε "Η εκπαίδευση απέτυχε" αλλιώς πήγαινε στο Βήμα 2.

Να σημειώσουμε εδώ ότι για να εξασφαλίσουμε ότι ο B_k είναι καλά ορισμένος, δεν κάνουμε ενημέρωση αν ισχύει η ανίσωση $s_k^T y_k \leq 10^{-6} \|s_k\| \|y_k\|$.

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε το θεώρημα σύγκλισης του Αλγορίθμου CM-BFGS.

Θεώρημα 13.1. [10]. Έστω ότι οι Υποθέσεις 3.3 και 13.1 ισχύουν και έστω ότι οι ακολουθίες $\{p_k\}$ και $\{d_k\}$ είναι φραγμένες. Έστω η ακολουθία των βαρών $\{w_k\}$ παράγεται από τον Αλγόριθμο CM-BFGS τότε ισχύει ότι:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_k = 0 \quad \text{και} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} d_k^T B_k d_k = 0.$$

Σε αυτό το σημείο αξίζει να τονίσουμε ότι εξ' ορισμού η συνάρτηση σφάλματος E είναι δύο φορές παραγωγίσιμη στο $\mathbb{R}$ άρα η Υπόθεση 3.3 ισχύει πάντα.

13.5 Εφαρμογή του Αλγόριθμου CM-BFGS για την Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Σε αυτή την ενότητα, αξιολογούμε την απόδοση του προτεινόμενου αλγορίθμου εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων CM-BFGS με τον L-BFGS [75, 100] σε έξι γνωστά προβλήματα κατηγοριοποίησης από τη UCI βάση δεδομένων μηχανικής μάθησης [97]: το πρόβλημα του καρκίνου του μαστού, το πρόβλημα του διαβήτη, το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας, το πρόβλημα έγκρισης πιστωτικών καρτών στην Αυστραλία, το πρόβλημα e.coli και το πρόβλημα yeast. Επίσης, συγκρίναμε την απόδοση του προτεινόμενου αλγορίθμου με την απόδοση των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων. Συνοπτικά, οι μέθοδοι συζυγών κλίσεων, οι οποίες χρησιμοποιήσαμε είναι οι εξής: Fletcher-Reeves (FR-CG) [45], Polak-Ribière (PR-CG) [110] και Scaled Conjugate Gradient (SCG-CG) [94].

Επίσης, για την αξιολόγηση των μεθόδων χρησιμοποιήσαμε τα προφίλ απόδοσης των Dolan και Moré [38] ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς και ως προς τους υπολογισμούς της κλίσεων. Σε όλα τα δίκτυα εισαγάγαμε την ίδια ακολουθία εισερχόμενων προτύπων, ενώ τα αρχικά βάρη αρχικοποιήθηκαν με την καθιερωμένη μέθοδο Nguyen-Widrow [99]. Για να αξιολογήσουμε την ακρίβεια κατηγοριοποίησης, χρησιμοποιήσαμε τη διαδικασία διασταυρωμένης επικύρωσης k -σημείων (k -fold cross validation) [69]. Όλες οι προσομοιώσεις έγιναν σε έναν Pentium-IV dual core υπολογιστή (2.0MHz, 1Gbyte RAM), χρησιμοποιώντας το λειτουργικό σύστημα Linux. Για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε πρωτίτως η πλατφόρμα MATLAB και εν συνεχεία ενσωματώθηκε αυτούσιος ο υλοποιημένος σε FORTRAN κώδικας, δημιουργώντας δυαδικά MEX αρχεία.

13.5.1 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Μαστού

Στην Εικόνα 13.1 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα του καρκίνου του μαστού, με σκοπό τη διερεύνηση της αποτελεσματικότητας και της δυναμικότητας της κάθε μεθόδου εκπαίδευσης. Αναφορικά με τους συναρτησιακούς υπολογισμούς, αμφότερες οι μέθοδοι είχαν την ίδια συμπεριφορά, με τον CM-BFGS να επιτυγχάνει μία ελαφρώς καλύτερη αποδοτικότητα. Το προφίλ απόδοσης ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων δείχνει ότι ο αλγόριθμος CM-BFGS είναι πολύ πιο αποδοτικός και δυναμικός από τον αλγόριθμο LBFGS.

Επισημαίνουμε ότι ο υπολογισμός της κλίσης της συνάρτησης σφάλματος είναι μία εξαιρετικά χρονοβόρα διαδικασία κατά την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Επομένως, είναι σαφές ότι ο CM-BFGS υπερέρχει κατά πολύ διότι εξοικονομεί πολλούς υπολογισμούς κλίσεων και κατά συνέπεια υπολογιστικό χρόνο.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.1: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του καρκίνου του μαστού

13.5.2 Το Πρόβλημα του Διαβήτη

Η Εικόνα 13.2 παρουσιάζει τα προφίλ αποδοτικότητας ως προς τον αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και τον αριθμό υπολογισμών κλίσεων, για το πρόβλημα του διαβήτη. Στην Εικόνα 13.2(i) βλέπουμε ότι και οι δύο μέθοδοι έχουν την ίδια απόδοση, με τον CM-BFGS να έχει ένα μικρό προβάδισμα έναντι του LBFGS, ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς. Επιπλέον, η Εικόνα 13.2(ii) δείχνει ότι η προτεινόμενη μέθοδος είναι η πιο αποδοτική μέθοδος εκπαίδευσης όσον αφορά τους υπολογισμούς κλίσεων.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.2: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του διαβήτη

13.5.3 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας

Η Εικόνα 13.3 παρουσιάζει το προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας. Ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς βλέπουμε ότι οι μέθοδοι CM-BFGS και L-BFGS υπερτερούν των μεθόδων συζυγών κλίσεων, με την CM-BFGS να καταγράφει ελαφρώς καλύτερη απόδοση. Όσον αφορά τον αριθμό υπολογισμών κλίσεων ο CM-BFGS παρουσιάζει την καλύτερη απόδοση, επιδεικνύοντας το μικρότερο αριθμό υπολογισμών κλίσεων σχεδόν σε όλες τις προσομοιώσεις.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.3: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα του διάγνωσης της καρδιακής ανεπάρκειας

13.5.4 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πίστωσης στην Αυστραλία

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.4: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα της έγκρισης πίστωσης στην Αυστραλία.

Η Εικόνα 13.4 παρουσιάζει τα προφίλ απόδοσης του προβλήματος έγκρισης πίστωσης στην Αυστραλία, όπου βλέπουμε ότι καλύτερος αλγόριθμος και στους δύο δείκτες απόδοσης, φαίνεται να είναι ο CM-BFGS. Πιο συγκεκριμένα, η Εικόνα 13.4(i) δείχνει ότι ο CM-BFGS είναι ο πιο αποδοτικός αλγόριθμος, αφού η καμπύλη του είναι πιο πάνω από την αντίστοιχη καμπύλη του LBFGS αλγόριθμου. Επίσης, είναι ενδιαφέρον να παρατηρήσουμε ότι στην Εικόνα 13.4(ii), ο προτεινόμενος αλγόριθμος έχει ξεκάθαρα την καλύτερη απόδοση, υπερνικώντας του κλασικού αλγορίθμου, αναφορικά με τον αριθμό υπολογισμών κλίσεων που απαιτούνται για να επιλυθεί το συγκεκριμένο πρόβλημα.

13.5.5 Το Πρόβλημα E.coli

Στην Εικόνα 13.5 παρουσιάζονται τα προφίλ απόδοσης ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς και τους υπολογισμούς κλίσεων για το πρόβλημα e.coli. Όπως προκύπτει από το συγκεκριμένο σχήμα, ο καλύτερος αλγόριθμος φαίνεται να είναι ο CM-BFGS, τόσο ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς, όσο και ως προς τον αριθμό των υπολογισμών κλίσεων. Προφανώς, από την Εικόνα 13.5(ii), μπορούμε να δούμε ότι η απόδοση των δύο συγκρινόμενων αλγορίθμων διαφέρει αισθητά, αναφορικά με το δεύτερο δείκτη απόδοσης.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.5: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα e.coli.

13.5.6 Το Πρόβλημα Yeast

Στην Εικόνα 13.6 απεικονίζονται τα προφίλ απόδοσης για το πρόβλημα yeast ως προς τους δύο δείκτες απόδοσης. Παρατηρούμε ότι ο CM-BFGS υπερνικά σημαντικά έναντι του LBFGS, παρουσιάζοντας την καλύτερη αποδοτικότητα και δυναμική, τόσο ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς, όσο και ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων. Συγκεκριμένα ο CM-BFGS εκπαιδεύει το 72% των προσομοιώσεων με το μικρότερο αριθμό συναρτησιακών υπολογισμών και υπολογισμό κλίσεων.

(i) Απόδοση ως προς τους συναρτησιακούς υπολογισμούς.

(ii) Απόδοση ως προς τους υπολογισμούς κλίσεων.

Εικόνα 13.6: Προφίλ απόδοσης των μεθόδων L-BFGS, CM-BFGS, FR-CG, PR-CG και SCG για το πρόβλημα yeast.

13.6 Εφαρμογή του Αλγόριθμου CM-BFGS για την Κατηγοριοποίηση Βιοϊατρικών Δεδομένων Μεγάλης Διάστασης

Κατά τη διάρκεια των τελευταίων πενήντα ετών, η βιολογία και η ιατρική έχουν μετατραπεί από ποιοτικές επιστήμες, οι οποίες βασιζόντουσαν στην παρατήρηση των ζωντανών οργανισμών, σε περισσότερο ποσοτικές επιστήμες, οι οποίες βασίζονται στη συλλογή δεδομένων σε μοριακό επίπεδο.

Η αυξανόμενη έρευνα και οι εξελίξεις σε αυτούς τους τομείς συνιστούν στην εκθετική αύξηση των βιοϊατρικών δεδομένων σε μέγεθος, διάσταση και πολυπλοκότητα. Επιπλέον, αυτά τα βιοϊατρικά σύνολα δεδομένων έχουν μη γραμμική σχέση μεταξύ των δεδομένων εισόδου και εξόδου, εμποδίζοντας την ανάλυση και τη μοντελοποίηση τους. Έτσι, η έρευνα έχει επικεντρωθεί στην ανάπτυξη ευφυών υπολογιστικών συστημάτων, όπως τα ΤΝΔ. Όμως η μεγάλη διάσταση των δεδομένων καθιστά το πρόβλημα της κατηγοριοποίησης δύσκολο για δύο λόγους:

1. Η εκπαίδευση των ΤΝΔ συνιστά ένα πολύ δύσκολο πρόβλημα ελαχιστοποίησης μεγάλης διάστασης εξαιτίας της μεγάλης διάστασης των δεδομένων.
2. Τα αποτελέσματα της ικανότητας γενίκευσης των εκπαιδευόμενων δικτύων δεν είναι υψηλά.

Για την αντιμετώπιση των παραπάνω προβλημάτων έχει προταθεί στην βιβλιογραφία η χρήση τεχνικών μείωσης της διάστασης ή επιλογής των δεδομένων ως ένα βήμα προεπεξεργασίας των δεδομένων έτσι ώστε να μπορούν να εφαρμοστούν οι κλασικοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης.

Σε αυτή την ενότητα, εκτιμούμε την απόδοση της γενίκευσης των τεχνητών νευρωνικών δικτύων, τα οποία εκπαιδεύτηκαν με τον αλγόριθμο CM-BFGS, σε μεγάλης κλίμακας δεδομένα βιοϊατρικής. Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο CM-BFGS μπορεί να εφαρμοστεί απευθείας σε προβλήματα μεγάλης διάστασης, θελήσαμε να αποτιμήσουμε παράλληλα διάφορες τεχνικές

μείωσης διάστασης, που έχουν προταθεί πρόσφατα στη διεθνή βιβλιογραφία, με γνώμονα πάντα τη γενίκευση των εκπαιδευόμενων δικτύων. Συγκεκριμένα, διερευνήσαμε πειραματικά την επίπτωση της εφαρμογής μίας τεχνικής μείωσης διάστασης, ως προστάδιο της εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων. Τα σύνολα δεδομένων μεγάλης διάστασης, τα οποία επιλέξαμε είναι τα ακόλουθα:

- Ογκος του ορθού [Δ1].
- Πρόβλεψη διάχυσης μεγάλου λεμφώματος Β-κυττάρων [Δ2]-[Δ3].
- Πνευμονικά αδενοκαρκινώματα [Δ4].
- Πρόβλεψη όγκων κεντρικού νευρικού συστήματος [Δ5].
- Πρόβλεψη προσάτη [Δ6].

Για όλα τα παραπάνω σύνολα δεδομένων [Δ1]-[Δ6], οι παράμετροι στον αλγόριθμο CM-BFGS τέθηκαν οι εξ' ορισμού τιμές $c_1 = c_2 = 10^{-4}$ [76]. Τα αρχικά βάρη αρχικοποιήθηκαν σύμφωνα με τη μέθοδο των Nguyen-Widrow [99]. Για την εκτίμηση της ακρίβειας της κατηγοριοποίησης, για τα προβλήματα [Δ1]-[Δ5] χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων ενώ για το τελευταίο πρόβλημα [Δ6] χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση τεσσάρων (4) σημείων.

Προκειμένου να εφαρμόσουμε τις τεχνικές μείωσης διάστασης στα αρχικά δεδομένα, απαιτείται να ορίσουμε την επιθυμητή τιμή της διάστασης (target dimensionality), η οποία αναπαριστά την διάσταση του υπόχωρου στον οποίο θέλουμε να απεικονίσουμε τα δεδομένα μας. Ο ορισμός της συγκεκριμένης αυτής τιμής γίνεται μέσω του *εκτιμητή μέγιστης πιθανοφάνειας* (maximum likelihood intrinsic dimensionality estimator) [74]. Για όλες τις τεχνικές μείωσης διάστασης χρησιμοποιήσαμε τις προεπιλεγμένες παραμέτρους όπως ορίζονται στην [125]. Όλες οι προσομοιώσεις έγιναν σε Pentium-IV dual core υπολογιστή (2.0MHz, 1Gbyte RAM), χρησιμοποιώντας το λειτουργικό σύστημα Linux ενώ χρησιμοποιήθηκε η εργαλειοθήκη νευρωνικών δικτύων του MATLAB 2008.

Σύνολο Δεδομένων	Δεδομένα πολλών μεταβλητών			Δεδομένα λίγων μεταβλητών		
	Είσοδοι	Νευρώνες στα κρυφά στρώματα	Σύνολο βαρών	Είσοδοι	Νευρώνες στο κρυφό στρώμα	Σύνολο βαρών
Δ1	2000	10-5	20077	11	6	86
Δ2	7129	10-5	71367	22	11	277
Δ3	7129	20-5-10	142787	24	12	326
Δ4	7129	5-5	35692	24	12	326
Δ5	7129	20-5-10	142787	30	15	497
Δ6	12600	10-10	126142	16	8	157

Πίνακας 13.1: Αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων

Ο Πίνακας 13.1 περιέχει πληροφορίες σχετικά με την αρχιτεκτονική των δικτύων και το συνολικό αριθμό βαρών που χρησιμοποιήθηκαν. Τα δίκτυα αυτά εκπαιδεύτηκαν σε μικρής

και μεγάλης διάστασης δεδομένα για καθένα από τα προβλήματα [Δ1]-[Δ6]. Στον Πίνακα 13.1, ο αριθμός των εισόδων συμπίπτει με την εγγενή διάσταση d που λαμβάνεται από τον εκτιμητή μέγιστης πιθανοφάνειας.

Σύνολο Δεδομένων	None	PCA	LPP	OLPP	KPCA	LEM	LTSA
Δ1	84.5	85.4	47.6	76.9	51.5	80.1	56.8
Δ2	53.7	53.7	58.1	52.0	54.8	50.9	44.3
Δ3	84.0	84.5	66.0	84.3	66.4	82.1	58.9
Δ4	89.5	89.6	88.7	90.1	89.2	89.4	89.4
Δ5	61.3	63.9	49.1	51.2	65.0	57.3	46.0
Δ6	52.3	54.7	52.8	55.6	41.9	51.8	53.6

Πίνακας 13.2: Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας τη CM-BFGS μέθοδο.

Στον Πίνακα 13.2 συνοψίζονται τα αποτελέσματα της γενίκευσης των νευρωνικών δικτύων, τα οποία εκπαιδεύτηκαν με τον αλγόριθμο CM-BFGS, πάνω σε μεγάλης και μικρής διάστασης δεδομένα. Κάθε στήλη αναφέρει τη μέση απόδοση σε ποσοστό για κάθε σύνολο δεδομένων, χρησιμοποιώντας διαφορετικές τεχνικές μείωσης διάστασης. Η στήλη «None» δείχνει τα αποτελέσματα που προέκυψαν με τα αρχικά δεδομένα (μεγάλης κλίμακας προβλήματα). Η καλύτερη τεχνική για ένα σύνολο δεδομένων απεικονίζεται με έντονη γραφή. Πρωτίστως, παρατηρούμε ότι η απόδοση ως προς την κατηγοριοποίηση των εκπαιδευόμενων δικτύων δε βελτιώθηκε σημαντικά από τη μείωση διάστασης. Εντούτοις, βλέπουμε ότι οι γραμμικές τεχνικές (PCA, LPP, OLPP) υπερτερούν έναντι των μη γραμμικών τεχνικών (KPCA, LEM, LTSA), αφού παρουσιάζουν τα καλύτερα αποτελέσματα γενίκευσης σε πέντε σύνολα δεδομένων. Επιπρόσθετα, παρατηρούμε ότι ο παραδοσιακός PCA είναι η καλύτερη τεχνική μείωσης διάστασης, η οποία παρουσίασε την καλύτερη συνολικά απόδοση.

Σύνολο Δεδομένων	PCA	LPP	OLPP	KPCA	LEM	LTSA
Δ1	85.4	48.5	76.7	52.9	80.6	57.3
Δ2	53.9	58.9	52.7	55.3	50.1	44.0
Δ3	84.1	66.0	84.1	65.9	82.9	57.2
Δ4	89.6	88.9	90.0	89.2	89.5	89.4
Δ5	64.5	50.3	51.0	65.8	57.9	46.0
Δ6	54.4	52.8	56.1	41.8	53.4	54.2

Πίνακας 13.3: Απόδοση γενίκευσης (%) νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιώντας την BFGS μέθοδο

Ο Πίνακας 13.3 αναφέρει τα αποτελέσματα γενίκευσης των νευρωνικών δικτύων που εκπαιδεύτηκαν χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο BFGS (trainbfg), του toolbox του MATLAB, πάνω στα δεδομένα μικρής διάστασης, τα οποία ανακτήθηκαν από τις παρούσες τεχνικές μείωσης διάστασης. Ας σημειώσουμε ότι η διαδικασία εκπαίδευσης για τον BFGS αλγόριθμο είναι αδύνατη αν χρησιμοποιηθούν τα αρχικά δεδομένα. Οι ακριβείς αρχιτεκτονικές των δικτύων φαίνονται στο δεύτερο μισό του Πίνακα 13.1. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα του Πίνακα 13.3 με τη δεύτερη στήλη («None») του Πίνακα 13.2, παρατηρούμε ότι και οι δύο αλγόριθμοι έχουν παρόμοια συμπεριφορά. Αυτό δείχνει ότι ο αλγόριθμος CM-BFGS είναι κατάλληλος όχι μόνο για μεγάλης κλίμακας δίκτυα, αλλά μπορεί να επιτύχει εξίσου ικανοποιητικά αποτελέσματα γενίκευσης και σε μικρής διάστασης δίκτυα.

13.7 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο, εξετάσαμε την αποδοτικότητα του CM-BFGS αλγορίθμου ελάχιστης μνήμης. Ο προτεινόμενος αλγόριθμος εφαρμόστηκε για την εκπαίδευση τεχνητών νευρωνικών δικτύων και κατηγοριοποίησης μεγάλων βιοϊατρικών δεδομένων. Όπως είδαμε από τα πειραματικά αποτελέσματα, ο αλγόριθμος έχει μεγάλη αποδοτικότητα, όπως και πολύ καλή ταχύτητα επίλυσης των προβλημάτων. Σε αυτό συμβάλει το γεγονός ότι ο αλγόριθμος CM-BFGS εκμεταλλεύεται πληροφορία από την ιδιοσύνθεση του προσεγγιστικού Ερμιτιανού πίνακα της αντικειμενικής συνάρτησης. Την πληροφορία αυτή την εισάγει μέσω μίας κατάλληλης αναζήτησης, είτε γραμμικής ή καμπυλόγραμμης, ανάλογα με το είδος της πληροφορίας που χρησιμοποιεί στην εκάστοτε επανάληψη. Ο αλγόριθμος είναι σχεδιασμένος με τέτοιο τρόπο, έτσι ώστε το ποσό της μνήμης που απαιτείται για τον υπολογισμό τόσο των μικρότερων ιδιοτιμών όσο και των αντίστοιχων ιδιοδιανύσματος να είναι αμελητέο. Συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος CM-BFGS έχει χωρική πολυπλοκότητα $O(n)$, με αποτέλεσμα πολύ μεγάλα προβλήματα να μπορούν να επιλυθούν πολύ γρήγορα και αποτελεσματικά.

Μέρος VI

**Συμπεράσματα - Παραρτήματα -
Ευρετήριο - Βιβλιογραφία**

Συμπεράσματα Διατριβής

Στο κεφάλαιο αυτό ανακεφαλαιώνουμε τις βασικές μεθόδους βελτιστοποίησης και εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων που προτείνουμε, καθώς και τα βασικά συμπεράσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή τους.

Η συνεισφορά της παρούσας διατριβής επικεντρώνεται στην ανάπτυξη και στη Μαθηματική θεμελίωση νέων μεθόδων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς και στη μελέτη και στην εφαρμογή νέων μεθόδων εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων με επίβλεψη.

Αρχίζουμε τη παρουσίαση του ερευνητικού έργου της διατριβής παρουσιάζοντας δύο νέες μεθόδους βελτιστοποίησης, οι οποίες ανήκουν στην κλάση των μεθόδων συζυγών κλίσεων. Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 6, παρουσιάζουμε μία τροποποίηση της μεθόδου του Perry, η οποία βασίζεται στην MBFGS εξίσωση της τέμνουσας. Επίσης στο Κεφάλαιο 7, παρουσιάζουμε μία νέα μέθοδο συζυγών κλίσεων, η οποία προσεγγίζει την επιφάνεια της αντικειμενικής συνάρτησης με μεγαλύτερη ακρίβεια εκμεταλλευόμενη την εξίσωση της τέμνουσας των Babai et al. [13] και αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Dai-Liao. Μία σημαντική ιδιότητα και των δύο προτεινόμενων μεθόδων είναι ότι εγγυώνται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης, αποφεύγοντας τις συχνά αναποτελεσματικές επανεκκινήσεις. Επιπλέον, αποδείξαμε την ολική σύγκλιση των προτεινόμενων μεθόδων για μη κυρτές συναρτήσεις δεδομένου ότι η γραμμική αναζήτηση χρησιμοποιεί τις συνθήκες Wolfe. Με βάση τα αριθμητικά μας αποτελέσματα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι οι νέες μέθοδοι έχουν πολύ καλή υπολογιστική αποτελεσματικότητα, όπως και καλή ταχύτητα επίλυσης των προβλημάτων, υπερτερώντας σημαντικά των κλασικών μεθόδων συζυγών κλίσεων.

Στα επόμενα κεφάλαια μελετήσαμε την ανάπτυξη και τη μελέτη νέων μεθόδων εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων. Στα Κεφάλαια 10 και 11 παρουσιάζονται νέες μέθοδοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων, οι οποίες αποτελούν τροποποιήσεις της μεθόδου συζυγών κλίσεων του Perry. Τα θεωρητικά πλεονεκτήματα των μεθόδων είναι η εξασφάλιση επαρκούς μείωσης ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και η εξασφάλιση ολικής σύγκλισης για μη κυρτές συναρτήσεις. Οι νέες μέθοδοι εκπαίδευσης εφαρμόστηκαν σε προβλήματα κατηγοριοποίησης από το πεδίο της τεχνητής νοημοσύνης και της βιοπληροφορικής. Οι προτεινόμενες μέθοδοι παρουσιάζουν ταχύτατη, ομαλή και σθεναρή σύγκλιση, με αποτέλεσμα να υπερτερούν σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης τόσο σε αποδοτικότητα όσο και σε ευρωστία, καταλήγοντας στο συμπέρασμα ότι βελτιώνουν σημαντικά τη ταχύτητα σύγκλισης της διαδικασίας εκπαίδευσης. Τέλος, η αύξηση στη ταχύτητα εκπαίδευσης, δεν έχει αρνητικές συνέπειες στην ικανότητα γενίκευσης των εκπαιδευόμενων νευρωνικών δικτύων, αφού αυτά παρουσίασαν πολύ υψηλή ικανότητα γενίκευσης. Επηηρεασμένοι από τα θεωρητικά και πρακτικά αποτελέσματα των μεθόδων εκπαίδευσης που παρουσιάσαμε στα

προηγούμενα κεφάλαια, στο Κεφάλαιο 12 παρουσιάσαμε μία νέα μέθοδο εκπαίδευσης συζυγών κλίσεων, η οποία εγγυάται επαρκή μείωση ανεξάρτητα από την ακρίβεια της γραμμικής αναζήτησης και αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Polak-Ribière. Μία σημαντική ιδιότητα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι προσεγγίζει την επιφάνεια της συνάρτησης σφάλματος με μεγαλύτερη ακρίβεια εκμεταλλευόμενη μία νέα εξίσωση της τέμνουσας. Επίσης, ένα ακόμα θεωρητικό πλεονέκτημα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι συγκλίνει ολικά για μη κυρτές συναρτήσεις. Με βάση τα αποτελέσματα των προσομοιώσεών μας διαπιστώνουμε ότι η προτεινόμενη μέθοδος υπερτερεί σημαντικά των κλασικών μεθόδων εκπαίδευσης και βελτιώνει σημαντικά την αποδοτικότητα της διαδικασίας εκπαίδευσης.

Η παρουσίαση του ερευνητικού μέρους της διατριβής ολοκληρώνεται στο Κεφάλαιο 13, όπου προτείνουμε μία νέα μέθοδο εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων, η οποία βασίζεται σε μία καμπυλόγραμμη αναζήτηση. Η μέθοδος χρησιμοποιεί τη BFGS ενημέρωση ελάχιστης μνήμης για τον υπολογισμό των κατευθύνσεων μείωσης, η οποία αντλεί πληροφορία από την ιδιοσύνθεση του προσεγγιστικού Εσσιανού πίνακα, αποφεύγοντας οποιαδήποτε αποθήκευση ή παραγοντοποίηση πίνακα, έτσι ώστε η μέθοδος να μπορεί να εφαρμοστεί για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων μεγάλης κλίμακας. Ο αλγόριθμος εφαρμόζεται σε προβλήματα από το πεδίο της τεχνητής νοημοσύνης και της βιοπληροφορικής καταγράφοντας ενθαρρυντικά αποτελέσματα υπερτερώντας σημαντικά της κλασικής μεθόδου.

Τις τελευταίες δεκαετίες, η αυξανόμενη έρευνα και οι εξελίξεις στους τομείς της ιατρικής και της βιολογίας συμβάλουν στην εκθετική αύξηση των βιοϊατρικών δεδομένων σε μέγεθος, διάσταση και πολυπλοκότητα. Επιπλέον, αυτά τα βιοϊατρικά σύνολα δεδομένων έχουν μη γραμμική σχέση μεταξύ των δεδομένων εισόδου και εξόδου, εμποδίζοντας την ανάλυση και τη μοντελοποίηση τους. Τα παραπάνω καθιστούν το πρόβλημα της κατηγοριοποίησης αυτών των δεδομένων, χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα, εξαιρετικά δύσκολο για δύο λόγους:

1. Η εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων συνιστά ένα πολύ δύσκολο πρόβλημα ελαχιστοποίησης μεγάλης διάστασης εξαιτίας της μεγάλης διάστασης των δεδομένων.
2. Τα αποτελέσματα της ικανότητας γενίκευσης των εκπαιδευόμενων δικτύων δεν είναι υψηλά.

Λαμβάνοντας υπόψη ότι ο CM-BFGS μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα μεγάλης διάστασης, εφαρμόσαμε τη μέθοδο για την εκπαίδευση μεγάλων νευρωνικών δικτύων για την κατηγοριοποίηση βιοϊατρικών δεδομένων, καταγράφοντας πολύ καλά αποτελέσματα.

Επίσης, τα τελευταία χρόνια έχει προταθεί στη διεθνή βιβλιογραφία, η εφαρμογή των τεχνικών μείωσης της διάστασης των δεδομένων ως προστάδιο της εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων, με σκοπό την αύξηση της ικανότητας γενίκευσης των εκπαιδευόμενων δικτύων. Γι' αυτό το λόγο, διερευνήσαμε πειραματικά και αξιολογήσαμε την εφαρμογή τεχνικών μείωσης της διάστασης δεδομένων στην απόδοση της γενίκευσης των τεχνητών νευρωνικών δικτύων, τα οποία εκπαιδεύτηκαν με τον αλγόριθμο CM-BFGS, σε μεγάλης κλίμακας δεδομένα βιοϊατρικής. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεών μας είναι ενθαρρυντικά και δείχνουν τη χρησιμότητα και την εφαρμοσιμότητα όλων των τεχνικών που παρουσιάσαμε.

Προβλήματα Κατηγοριοποίησης από τη Βάση Δεδομένων UCI

A.1 Το Πρόβλημα Fisher's Iris

Το πρόβλημα κατηγοριοποίησης Fisher's iris αποτελεί πιθανότατα το πιο διάσημο πρόβλημα στον τομέα της αναγνώρισης προτύπων [97]. Το σύνολο δεδομένων αποτελείται από τρεις (3) κλάσεις των πενήντα (50) παραδειγμάτων η κάθε μία, όπου κάθε κλάση αναφέρεται στον τύπο του φυτού iris. Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν αποτελούνται από ένα (1) κρυφό στρώμα με επτά (7) νευρώνες και τρεις (3) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [115]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.01$ μέσα στο όριο των χιλίων (1000) εποχών και για την αξιολόγηση των δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων [78].

A.2 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Μαστού

Το αυτό πρόβλημα αφορά τη διάγνωση του κακοήθους καρκίνου του μαστού. Τα δεδομένα έχουν συλλεχθεί από εξακόσιους ογδόντα τρεις (683) ασθενείς από το Πανεπιστήμιο του Wisconsin. Κάθε ασθενής έχει εννέα (9) χαρακτηριστικά και μια ετικέτα κατηγοριοποίησης (κακοήθους ή καλοήθους όγκος). Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν αποτελούνται από δύο (2) κρυφά στρώματα, με τέσσερις (4) και δύο (2) νευρώνες, αντίστοιχα και δύο (2) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [115]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.02$, μέσα σε ένα όριο δύο χιλιάδων (2000) εποχών. Όλα τα δίκτυα αξιολογήθηκαν χρησιμοποιώντας τη διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων.

A.3 Το Πρόβλημα του Διαβήτη

Ο σκοπός αυτού του προβλήματος κατηγοριοποίησης είναι να αποφασίσει πότε οι γυναίκες της ινδιάνικης φυλής Pima (ή Akimel O'odham) είναι θετικές στον διαβήτη ή όχι. Τα δεδομένα αποτελούνται από επτακόσια εξήντα οκτώ (768) διαφορετικά πρότυπα, καθένα εκ των οποίων έχει οχτώ (8) χαρακτηριστικά και μια ετικέτα κατηγοριοποίησης (θετικό ή μη ως προς το διαβήτη). Χρησιμοποιήσαμε νευρωνικά δίκτυα, τα οποία αποτελούνται από δύο (2) κρυφά στρώματα των τεσσάρων (4) νευρώνων και δύο (2) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [115]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.14$, μέσα σε ένα όριο δύο χιλιάδων (2000) εποχών.

Όλα τα δίκτυα αξιολογήθηκαν χρησιμοποιώντας τη διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων [136].

A.4 Το Πρόβλημα της Έγκρισης Πίστωσης στην Αυστραλία

Το σύνολο δεδομένων αυτού του προβλήματος κατηγοριοποίησης περιέχει όλες τις λεπτομέρειες αναφορικά με τις αιτήσεις για απόκτηση πιστωτικής κάρτας στην Αυστραλία. Το συγκεκριμένο σύνολο δεδομένων είναι αρκετά ενδιαφέρον, διότι τα δεδομένα ποικίλουν και κάθε χαρακτηριστικό του μπορεί να έχει είτε μικρές είτε μεγάλες τιμές. Χρησιμοποιήσαμε νευρωνικά δίκτυα με δύο (2) κρυφά στρώματα, αποτελούμενα από δεκάξι (16) και οχτώ (8) νευρώνες, αντίστοιχα και δύο (2) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [115]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.1$, μέσα σε όριο χιλίων (1000) εποχών, ενώ όλα τα δίκτυα αξιολογήθηκαν χρησιμοποιώντας τη διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων [78].

A.5 Το Πρόβλημα Διάγνωσης της Καρδιακής Ανεπάρκειας

Το σύνολο δεδομένων περιέχει στιγμιότυπα εικόνων από τον αξονικό τομογράφο Proton Emission Computed Tomography (SPECT), από το Πανεπιστήμιο του Colorado [97]. Το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι πρόβλημα κατηγοριοποίησης, στο οποίο οι ασθενείς κατηγοριοποιούνται ως προς το αν έχουν κανονική εικόνα καρδιάς ή όχι. Η κατανομή αποτελείται από πενήντα πέντε (55) στιγμιότυπα της ανώμαλης κατηγορίας (20.6%) και διακόσια δώδεκα (212) στιγμιότυπα της κανονικής (79.4%). Η αρχιτεκτονική των δικτύων που χρησιμοποιήθηκε αποτελείται από ένα (1) κρυφό στρώμα με έξι (6) νευρώνες και ένα (1) νευρώνα στο στρώμα εξόδου [144]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.1$ μέσα σε ένα όριο χιλίων (1000) εποχών [78].

A.6 Το Πρόβλημα Κατηγοριοποίησης των Σημάτων του Sonar

Αυτό το σύνολο δεδομένων χρησιμοποιήθηκε από τους Gorman και Sejnowski [54] στη μελέτη τους για την κατηγοριοποίηση των σημάτων του ηχοεντοπιστικού συστήματος sonar χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα. Συγκεκριμένα, τα δεδομένα περιέχουν σήματα από μία πληθώρα γωνιών, τα οποία αποκομίστηκαν από ένα μηχάνημα sonar για την αναγνώριση μετάλλου ή βράχου. Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν γι' αυτό το πρόβλημα αποτελούνται από ένα (1) κρυφό στρώμα με εικοσιτέσσερις (24) νευρώνες και δύο (2) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [54]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.02$ μέσα στο όριο των 1000 εποχών και για την αξιολόγηση των δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση τεσσάρων (4) σημείων [54].

A.7 Το Πρόβλημα E.coli

Αυτό το πρόβλημα είναι βασισμένο σε ένα σύνολο 336 προτύπων και αφορά την ταξινόμηση των πρωτεϊνικών προτύπων e.coli σε οκτώ κλάσεις. Το e.coli είναι ένα προκαριωτικό βακτηρίδιο, το οποίο συνιστά ένα πολύ σημαντικό παράγοντα στην βιόσφαιρα. Τρεις είναι οι σημαντικοί τύποι πρωτεϊνών χαρακτηρίζονται στο e.coli: τα ένζυμα, οι μεταφορείς και οι ρυθμιστές. Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν γι' αυτό το πρόβλημα αποτελούνται από ένα (1) κρυφό στρώμα με δεκαέξι (16) νευρώνες και οκτώ (8) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [4]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.02$ μέσα στο όριο των δύο χιλιάδων (2000) εποχών [4] και για την αξιολόγηση των δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση τεσσάρων (4) σημείων [67].

A.8 Το Πρόβλημα Yeast

Το πρόβλημα yeast είναι παρόμοιο με το προηγούμενο πρόβλημα κατηγοριοποίησης και αναφέρεται στο πρόβλημα ταξινόμησης των κυτταρικών πρωτεϊνών yeast. Ο *Saccharomyces cerevisiae* (yeast) είναι ο απλούστερος ευκαριωτικός οργανισμός. Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν αποτελούνται από ένα (1) κρυφό στρώμα με δεκαέξι (16) νευρώνες και δέκα (10) νευρώνες στο στρώμα εξόδου [4]. Ως κριτήριο τερματισμού ορίστηκε το $E_G < 0.05$ μέσα στο όριο των δύο χιλιάδων (2000) εποχών και για την αξιολόγηση των δικτύων χρησιμοποιήθηκε η διασταυρωμένη επικύρωση δέκα (10) σημείων [4].

Προβλήματα Κατηγοριοποίησης Βιοϊατρικών Δεδομένων Μεγάλης Διάστασης

B.1 Το Πρόβλημα του Καρκίνου του Όρθου

Το πρόβλημα του καρκίνου του ορθού (colon tumor) περιλαμβάνει εξήντα δύο (62) δείγματα, τα οποία συλλέχθηκαν από ασθενείς με καρκίνο του ορθού (colon-cancer) [3]. Μεταξύ αυτών, σαράντα (40) βιοψίες όγκων είναι από κακοήγη (χαρακτηρισμένες ως αρνητικές) και είκοσι δύο (22) από υγιή μέρη του ορθού των ίδιων ασθενών (χαρακτηρισμένες ως θετικές). Συνολικά επιλέχθηκαν δύο χιλιάδες (2000) από περίπου έξι χιλιάδες πεντακόσια (6500) γονίδια, με βάση την αξιοπιστία της βιοψίας.

B.2 Το Πρόβλημα του Διάχυτου Λέμφωματος Β-Κυττάρων

Το σύνολο αυτό αποτελείται από δεδομένα ασθενών με διάχυτο λέμφωμα μεγάλων Β-κυττάρων (diffuse large b-cell lymphoma - DLBCL). Υπάρχουν δύο είδη κατηγοριοποίησης των ασθενών σύνολο δεδομένων [121]. Στο πρώτο είδος, τα δεδομένα κατηγοριοποιούνται με βάση τη μορφολογία του DLBCL έναντι της μορφολογίας του λεμφώματος ωοθηκών (FL). Το σύνολο αυτό των δεδομένων περιέχει πενήντα οχτώ (58) DLBCL δείγματα και δεκαεννιά (19) δείγματα FL. Ενώ στο δεύτερο είδος, τα δεδομένα κατηγοριοποιούνται με βάση εάν ένας ασθενής έχει το διάχυτο λέμφωμα μεγάλων Β-κυττάρων. Μεταξύ των πενήντα οχτώ (58) δειγμάτων από ασθενείς με DLBCL, τριάντα δύο (32) από αυτά είναι από ασθενείς που ανάρρωσαν, ενώ είκοσι έξι (26) από αυτά είναι από ασθενείς με θανατηφόρο ή ανθεκτική νόσο.

B.3 Το Πρόβλημα των Πνευμονικών Αδενοκαρκινώματων

Το σύνολο αυτό των δεδομένων αποτελείται από ογδόντα έξι (86) δείγματα πνευμονικών αδενοκαρκινωμάτων και από δέκα (10) μη νεοπλασματικά πνευμονικά δείγματα [16]. Κάθε δείγμα αποτελείται από επτά χιλιάδες εκατόν είκοσι εννέα (7129) γονίδια.

B.4 Το Πρόβλημα των Όγκων του Κεντρικού Νευρικού Συστήματος

Το σύνολο αυτό αποτελείται από δεδομένα για την πρόβλεψη εμβρυικών όγκων στο κεντρικό νευρικό σύστημα [111]. Ως επιζώντες αναφέρονται οι ασθενείς, οι οποίοι παρέμειναν στη ζωή μετά τη θεραπευτική αγωγή, ενώ αποτυχόντες είναι αυτοί οι οποίοι υπέκυψαν στην ασθένεια. Το σύνολο δεδομένων περιέχει εξήντα (60) δείγματα ασθενών, είκοσιένα (21) επιζώντες και τριάντα εννέα (39) αποτυχόντες. Συνολικά υπάρχουν επτά χιλιάδες εκατόν είκοσι εννέα (7129) γονίδια σε αυτό το σύνολο δεδομένων.

B.5 Το Πρόβλημα του Προστάτη

Το συγκεκριμένο σύνολο δεδομένων αναφέρεται στην πρόβλεψη του κλινικού αποτελέσματος όσον αφορά τον καρκίνο του προστάτη [122]. Είκοσι ένας (21) ασθενείς εκτιμήθηκαν ως προς τη μετεγχειρητική τους ανάρρωση. Οχτώ (8) ασθενείς υποτροπίασαν, ενώ δεκατρείς (13) ανάρρωσαν για τουλάχιστον τέσσερα (4) χρόνια.

Ευρετήριο Ελληνικών Όρων

Α

αόριστος πίνακας, 11
ακριβής γραμμική αναζήτηση, 28
αλγόριθμος εκπαίδευσης, 102
αλγόριθμος εκπαίδευσης τεχνητού
 νευρωνικού δικτύου, 112
αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης
 του σφάλματος, 103, 114, 116
αλγόριθμος της οπίσθιας διάδοσης
 του σφάλματος διαμέσου
 του χρόνου, 119
αλγόριθμοι ευρείας σύγκλισης, 5
αλγόριθμος ελαχίστων μέσων
 τετραγώνων, 115
ανάστροφος πίνακας, 10
ανατροφοδοτούμενο νευρωνικό
 δίκτυο, 107, 118
ανισότητα Cauchy-Schwarz, 14
αντίστροφος πίνακας, 10
αντικειμενική συνάρτηση, 4
αρνητικά ορισμένος πίνακας, 10
αρχιτεκτονική νευρωνικού δικτύου, 105
ασθενής τοπικός ελαχιστοποιητής, 22
αυστηρός ελαχιστοποιητής, 24

Β

βάρος, 102
βελτιστοποίηση, 3, 4
βελτιστοποίηση με περιορισμούς, 4
βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς, 4

Γ

γραμμική αναζήτηση, 27
γραμμικό μοντέλο, 19
γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, 5
γραμμικός ρυθμός σύγκλισης, 15
γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα, 12
γραμμικώς εξαρτημένα διανύσματα, 12

Δ

δύο φορές συνεχής παραγωγίσιμη, 18
δεύτερης τάξης αναγκαία συνθήκη, 23
δεύτερης τάξης ικανή συνθήκη, 24
δεύτερης τάξης κρίσιμο σημείο, 23
διάνυσμα γραμμή, 12
διάνυσμα στήλη, 12
διαγώνιος πίνακας, 9
διασταυρωμένη επικύρωση
 k-σημείων, 127, 142, 151, 162
διπολική συνάρτηση ενεργοποίησης, 104
δυναμική συνάρτηση ενεργοποίησης, 104

Ε

εφικτή περιοχή, 4
εκπαίδευση με διόρθωση σφάλματος, 112
εκπαίδευση τεχνητού
 νευρωνικού δικτύου, 111
εκπαίδευσης, 104
εκπαίδευσης με αυτο-οργάνωση, 114
εκπαίδευσης χωρίς επίβλεψη, 114
εκτιμητή μέγιστης πιθανοφάνειας, 167
ελαχιστοποίησης, 4
εμπρόσθιας τροφοδότησης
 νευρωνικό δίκτυο, 105-107, 114
εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό
 δίκτυο ενός επιπέδου, 105
εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό
 δίκτυο πολλαπλών επιπέδων, 106
επίπεδο ενεργοποίησης, 104
εποχικής εκπαίδευσης, 119
Εσσιανός πίνακας, 19
εσωτερικό γινόμενο, 12
Ευκλείδεια νόρμα, 14
εξίσωση της τέμνουσας, 37, 46, 63,
 77, 147

Z

ζεύγος κατευθύνσεων μείωσης, 33

H

ημιαρνητικά ορισμένος πίνακας, 11

ημιθετικά ορισμένος πίνακας, 11

Θ

θεώρημα μέσης τιμής, 19

θετικά ορισμένος πίνακας, 10

I

ιδιοδιάνυσμα, 16

ιδιοτιμή, 16

ισχυρά κυρτή συνάρτηση, 20

ισχυρά ολικός ελαχιστοποιητής, 22

ισχυρά τοπικός ελαχιστοποιητής, 22

ισχυρές συνθήκες Wolfe, 30

K

κάτω τριγωνικός, 10

καμπυλόγραμμη αναζήτηση, 27

καμπυλότητα συνάρτησης, 21

κατά Lipschitz συνεχής συνάρτηση, 20

κατά τμήματα γραμμική συνάρτηση

ενεργοποίησης, 104

κατεύθυνση Newton, 36

κατεύθυνση απότομης μείωσης, 35

κατεύθυνση αρνητικής καμπυλότητας, 21,
27, 31

κατεύθυνση θετικής καμπυλότητας, 21

κατεύθυνση μείωσης, 23

κατεύθυνση συζυγών κλίσεων, 41

κατεύθυνση φασματικών συζυγών

κλίσεων, 48

κλίση αντικειμενικής συνάρτησης, 18

κοίλη συνάρτηση, 20

κρίσιμο σημείο, 23

κρυφό στρώμα, 105

κυρτή συνάρτηση, 20, 21

κυρτό σύνολο, 20

Λ

λογιστική συνάρτηση ενεργοποίησης, 104

M

μέθοδο της αντίστροφης δύναμης, 17

μέθοδο της αντίστροφης επανάληψης, 17

μέθοδος Fletcher-Reeves, 43

μέθοδοι καμπυλόγραμμης

αναζήτησης, 31

μέσο τετραγωνικό σφάλμα, 112

μεγιστοποίηση, 4

μεροληψία, 104

μεταβλητή, 4

μη γραμμικό πρόβλημα

βελτιστοποίησης, 5

μη-ακριθής γραμμική αναζήτηση, 28

μη γραμμικές μέθοδοι συζυγών

κλίσεων 40, 41

μοναδιαίος πίνακας, 10

N

νόρμα διανύσματος, 13

νόρμα πίνακα, 13

νευρώνας, 101

O

ολικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης, 5

ομαλές συναρτήσεις, 19

ορίζουσα πίνακα, 16

οριακό σημείο, 15

ορθογώνια διανύσματα, 12, 14

ορθογώνια προβολή, 11

ορθογώνιος πίνακας, 10

Π

πίνακας, 9

πίνακας μετασχηματισμού, 11

πίνακας ορθογώνιου

μετασχηματισμού, 11

πίνακας προβολής, 11

παραγωγίσιμη συνάρτηση, 18

περιοχή εμπιστοσύνης, 27

περιορισμένης μνήμης Quasi-Newton

μέθοδοι, 38

περιορισμός, 4

περιορισμοί ανισότητας, 4

περιορισμοί ισότητας, 4
πολυστρωματικό τεχνητό νευρωνικό
 δίκτυο, 105
ποσότητα Rayleigh, 17, 48, 58
πρόβλημα έγκρισης πίστωσης στην
 Αυστραλία, 128, 131, 143, 164, 174
πρόβλημα e.coli, 129, 132, 153, 165, 175
πρόβλημα iris, 128, 152
πρόβλημα yeast, 130, 144, 154, 165, 175
πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς
 περιορισμούς, 22
πρόβλημα διάγνωσης της καρδιακής
 ανεπάρκειας, 127, 130, 143, 164,
 174
πρόβλημα κατηγοριοποίησης των σημάτων
 του sonar, 144, 153, 174
πρόβλημα του διαβήτη, 142, 151,
 163, 173
πρόβλημα του καρκίνου του μαστού,
 162, 173
πρώτης τάξης αναγκαία συνθήκη, 23
προβολή, 11
προφίλ απόδοσης, 74, 87, 127, 142,
 151, 162
προσέγγιση κατά Taylor δεύτερης
 τάξης, 19
προσέγγιση κατά Taylor πρώτης
 τάξης, 19

P

ρυθμός σύγκλισης, 15

Σ

σήματα σφάλματος, 115
σήματα συναρτήσεων, 115
σαγματικό σημείο, 24
σημείο συσσώρευσης, 15
στρώμα εισόδου, 105
στρώμα εξόδου, 105
συμμετρικός πίνακας, 10
συνάρτηση ενεργοποίησης, 104
συνάρτηση ενεργοποίησης της
 υπερβολικής εφαπτομένης, 104
συνάρτηση κόστους, 112

συνάρτηση μοντέλο, 27
συνάψεις, 102
συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση, 18
συνθήκες βελτιστότητας, 5
συνθήκες Wolfe, 29
συνθήκες Wolfe 2ης τάξης, 34
συνθήκη καμπυλότητας, 29
συνθήκη συζυγίας, 42
συνθήκη Armijo, 29
συνθήκη Zoytendijk, 31
συζυγή διανύσματα, 12

T

ταυτοδύναμος, 11
ταυτοτική συνάρτηση ενεργοποίησης, 104
τετραγωνικό μοντέλο, 19
τετραγωνικός πίνακας, 9
τετραγωνικός ρυθμός σύγκλισης, 15
τοπικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης, 5
τριγωνική ανισότητα, 15
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Babaie-Kafaki et al., 53
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Li et al., 52, 147
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Wei et al., 51
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Zhang et al., 53
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Babaie-Kafaki et al., 77
τροποποιημένη εξίσωση της τέμνουσας
 των Li και Fukushima, 54, 63

Y

υπεργραμμικός ρυθμός σύγκλισης, 15

Φ

φάση παρεμβολής, 29
φάση της διχοτόμησης, 29
φάσμα πίνακα, 16
φαινόμενο της εξαφανιζόμενης
 κλίσης, 120
φαινομένο του φρακαρίσματος, 44,
 125, 149
φασματική μέθοδος συζυγών κλίσεων, 48

φασματική παράμετρος, 48, 58, 125, 137

X

χαρακτηριστική εξίσωση, 16

χαρακτηριστικό πολυώνυμο, 16

Ευρετήριο Αγγλικών Όρων

A

accumulation point, 15
activation function, 104
artificial neural networks, 101

B

backpropagation algorithm, 103, 114, 116
backpropagation through time algorithm, 119
BB spectral parameter, 48, 58, 141
BFGS ενημερώση ελάχιστης μνήμης, 57
bias, 104
bracketing phase, 28

C

Cauchy-Schwarz inequality, 14
characteristic equation, 16
characteristic polynomial, 16
column matrix, 12
concave function, 20
conjugate vector, 12
constraint, 4
convex function, 20
critical point, 23
convex set, 20
conjugacy condition, 42
constrained optimization, 4
convergence rate, 15
convex combination, 20
cost function, 112
curvilinear search, 27

D

determinant, 16
diagonal matrix, 10
differential function, 18
dot product, 12

dynamic memory, 118

E

eigenvector, 16
eigenvalue, 16
epochwise training, 119
equality, 4
error correction learning, 112
error signal, 115
exact line search, 28

F

feasible region, 4
feedforward neural network, 106
feedforward single layer neural network, 106
function signal, 115

G

global convergent algorithm, 5
global optimization algorithm, 5
gradient, 18
gradient descent, 112

H

Hessian matrix, 19
hidden layer, 105

I

inequality, 4
idempotent, 11
identity matrix, 10
indefinite matrix, 11
inexact line search, 28
input layer, 105
inverse iteration method, 17
inverse matrix, 10
inverse power method, 17

J

jamming phenomenon, 44

K

k -fold cross validation, 129, 145, 156, 166

L

l_1 -νόρμα, 14
 l_2 -νόρμα, 14
 l_∞ -νόρμα, 14
 layers, 101
 linear independent, 12
 least mean square algorithm, 115
 limited-memory Quasi-Newton methods, 38
 line search, 27
 linear convergence, 15
 linear model, 19
 linear optimization problem, 5
 local optimization algorithm, 5
 lower triangular matrix, 10

M

MBFGS Εξίσωση της Τέμνουσας, 54, 63
 matrix, 9
 maximization, 4
 maximum likelihood intrinsic dimensionality estimator, 167
 mean square error, 112
 memoryless BFGS update, 57
 minimization, 4

N

negative definite, 10
 neurons, 101
 norm, 13
 Newton direction, 36
 negative curvature direction, 21, 31
 neural network architecture, 105
 nonlinear conjugate gradient methods, 40, 41
 nonlinear optimization problem, 5
 nonsingular, 16

O

optimization, 4
 orthogonal matrix, 10
 optimality conditions, 5
 optimization, 3
 orthogonal projection matrix, 11
 orthogonal projection, 11
 orthogonal vectors, 12, 14
 output layer, 105

P

positive definite, 10
 performance profiles, 74
 positive curvature direction, 21
 projection matrix, 11
 projection, 11

Q

Quasi-Newton equation, 37
 Quasi-Newton εξίσωση, 37
 quadratic model, 19

R

Rayleigh quotient, 17, 48, 58
 recurrent neural network, 107
 row matrix, 12

S

saddle point, 24
 seminegative definite, 11
 semipositive definite, 11
 symmetric matrix, 10
 secant equation, 37
 self-organized learning, 114
 singular, 16
 smooth function, 19
 spectral conjugate gradient methods, 48
 spectral parameter, 58
 spectrum, 16
 square convergence, 15
 square matrix, 9
 stationary point, 23
 steepest descent direction, 35
 strictly convex function, 20
 superlinear convergence, 15

supervised learning, 113
synapse, 102

T

Taylor expansion, 19
training algorithm, 112
target dimensionality, 167
target response, 112
training algorithm, 102
training, 104
transformation matrix, 11
transpose matrix, 10
triangular inequality, 14
truncation, 126
trust region, 27

U

unconstrained optimization, 4
unsupervised learning, 114
upper triangular matrix, 10

V

variable, 4
vanishing gradient, 120
vector, 12

W

weight, 102

Κατάλογος Δημοσιεύσεων

Δημοσιεύσεις σε διεθνή περιοδικά

1. I.E. Livieris and P. Pintelas, An improved spectral conjugate gradient neural network training algorithm, *International Journal on Artificial Intelligence Tools*, Volume 21, No. 1, 2012.
2. I.E. Livieris and P. Pintelas, Globally convergent modified Perry conjugate gradient method, *Applied Mathematics and Computation*, Volume 218, No. 18, pp. 9197–9207, 2012.
3. I.E. Livieris and P. Pintelas, An advanced conjugate gradient training algorithm based on a modified secant equation, *ISRN Artificial Intelligence*, 2012.
4. I.E. Livieris and P. Pintelas, A descent Dai-Liao conjugate gradient method based on a modified secant equation and its global convergence, *ISRN Computational Mathematics*, 2012.

Δημοσιεύσεις σε πρακτικά συνεδρίων

1. I.E. Livieris and P. Pintelas, Performance evaluation of descent CG methods for neural network training, *In the Proceedings of the 9th Hellenic European Research on Computer Mathematics & its Applications Conference (HERCMA'09)*, 2009. Also included in *Hermis - An International Journal of Computer Mathematics and its Applications*, E.A. Lipitakis editor, Volume 11, pp. 40-46, 2009.
2. I.E. Livieris, D.G. Sotiropoulos and P. Pintelas, On descent spectral CG algorithms for training recurrent neural networks, *In the Proceedings of the 13th Panellenic Conference of Informatics*, pp. 65-69, 2009.
3. M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, I.E. Livieris, and P. Pintelas, A memory-less BFGS neural network training algorithm, *In the Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Industrial Informatics (INDIN'09)*, pp. 216-221, 2009.
4. I.E. Livieris, M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, S. Sioutas, and P. Pintelas, Classification of large biomedical data using ANNs based on BFGS method, *In the Proceedings of the 13th Panellenic Conference of Informatics*, pp. 87-91, 2009.

Βιβλιογραφία

- [1] M. Al-Baali, “Descent property and global convergence of the Fletcher-Reeves method with inexact line search”, *IMA Journal of Numerical Analysis*, Volume 5, pp. 121–124, 1985.
- [2] I. Aleksander and H. Morton, *An Introduction to Neural Computing*, Van Nostrand Reinhold Co., New York, NY, USA, 1990.
- [3] U. Alon, N. Barkai, D.A. Notterman, K. Gishdagger, S. Ybarradagger, D. Mackdagger, and A.J. Levine, “Broad patterns of gene expression revealed by clustering analysis of tumor and normal colon tissues probed by oligonucleotide arrays”, *In the Proceedings of the Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Volume 96, pp. 6745–6750, 1999.
- [4] A.D. Anastasiadis, G.D. Magoulas, and M.N. Vrahatis, “New globally convergent training scheme based on the resilient propagation algorithm”, *Neurocomputing*, Volume 64, pp. 253–270, 2005.
- [5] J.A. Anderson and E. Rosenfeld, *Neurocomputing: Foundations of Reasearch*, MIT Press, Cambridge, 1989.
- [6] N. Andrei, “Scaled memoryless BFGS preconditioned conjugate gradient algorithm for unconstrained optimization”, *Optimization Methods and Software*, Volume 22, pp. 561–571, 2007.
- [7] M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, and C.A. Botsaris, “Ελαχιστοποίηση Τετραγωνικών Συναρτήσεων που υπόκεινται σε ένα Τετραγωνικό Περιορισμό”, *Πρακτικά του 20ου Εθνικού Συνεδρίου της Ελληνικής Εταιρείας Επιχειρησιακών Ερευνών (20ΕΕΕΕ 2008)*, pp. 827–838, 2008.
- [8] M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, I.E. Livieris, and P. Pintelas, “A memoryless BFGS neural network training algorithm”, *In the Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Industrial Informatics (INDIN’09)*, pp. 216–221, 2009.
- [9] M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, and P. Pintelas, “Solving the quadratic trust-region subproblem in a low-memory BFGS framework”, *Optimization Methods and Software*, Volume 23, No. 5, pp. 651–674, 2008.
- [10] M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, and P. Pintelas, “A curvilinear method based on minimal-memory BFGS updates”, *Applied Mathematics and Computation*, Volume 217, No. 2, pp. 882–892, 2010.
- [11] L. Armijo, “Minimization of functions having Lipschitz continuous partial derivatives”, *Pacific Journal of Mathematics*, Volume 16, pp. 1–3, 1966.
- [12] O. Axelsson, *Iterative Solution Methods*, Cambridge University Press, 1996.

- [13] S. Babaie-Kafaki, R. Ghanbari, and N. Mahdavi-Amiri, “Two new conjugate gradient methods based on modified secant equations”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 234, pp. 1374–1386, 2010.
- [14] J. Barzilai and J.M. Borwein, “Two point step size gradient methods”, *IMA Journal of Numerical Analysis*, Volume 8, pp. 141–148, 1988.
- [15] S. Becker, “Unsupervised learning procedures for neural networks”, *International Journal of Neural Systems*, Volume 1991, pp. 17–33, 1991.
- [16] D.G. Beer, S.L. Kardia, C.C. Huang, T.J. Giordano, A.M. Levin, D.E. Misek, L. Lin, G. Chen, T.G. Gharib, D.G. Thomas, M.L. Lizyness, R. Kuick, S. Hayasaka, J.M. Taylor, M.D. Iannettoni, M.B. Orringer, and S. Hanash, “Gene-expression profiles predict survival of patients with lung adenocarcinoma”, *Nature Medicine*, Volume 8, No. 8, pp. 816–823, 2002.
- [17] Y. Bengio, P. Simard, and P. Frasconi, “Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult”, *In the Proceedings of the IEEE Transactions on Neural Networks*, Volume 5, pp. 157–166, 1994.
- [18] E.G. Birgin and J.M. Martínez, “A spectral conjugate gradient method for unconstrained optimization”, *Applied Mathematics and Optimization*, Volume 43, pp. 117–128, 1999.
- [19] E.G. Birgin, J.M. Martínez, and M. Raydan, “Structured minimal memory inexact Quasi-Newton method and secant preconditioners for augmented Lagrangian optimization”, *Computational Optimization and Applications*, Volume 39, No. 1, pp. 1–16, 2008.
- [20] C.M. Bishop, *Neural Networks for Pattern Recognition*, Oxford, 1995.
- [21] C.A. Botsaris, “A class of methods for unconstrained minimization based on stable numerical integration techniques”, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Volume 63, No. 3, pp. 729–749, 1978.
- [22] C.A. Botsaris, “A curvilinear optimization method based upon iterative estimation of the eigensystem of the Hessian matrix”, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Volume 63, No. 2, pp. 396–411, 1978.
- [23] C.A. Botsaris, “Differential gradient methods”, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Volume 63, No. 1, pp. 177–198, 1978.
- [24] C.A. Botsaris and D.H. Jacobson, “A Newton-type curvilinear search method for optimization”, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, Volume 54, No. 1, pp. 217–229, 1976.
- [25] J.R. Bunch and B.N. Parlett, “Direct methods for solving symmetric indefinite systems of linear equations”, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Volume 8, pp. 639–655, 1971.
- [26] A. Cauchy, “Methode generale pour la resolution des systemes d’equations simultanees”, *Compte Rendu des S’eances de L’Acad’emie des Sciences XXV*, Volume A, No. 25, pp. 536–538, 1847.
- [27] W. Chen and Q. Liu, “Sufficient descent nonlinear conjugate gradient methods with conjugacy condition”, *Numerical Algorithms*, Volume 53, pp. 113–131, 2010.
- [28] P.S. Churchland, *Neurophilosophy: Toward a Unified Science of the Mind/Brain*, MIT Press, Cambridge, 1986.

- [29] Y.H. Dai, J. Han, G. Liu, D. Sun, H. Yin, and Y. Yan, "Convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods", *SIAM Journal of Optimization*, Volume 2, pp. 345–358, 1999.
- [30] Y.H. Dai and L.Z. Liao, "New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods", *Applied Mathematics and Optimization*, Volume 43, pp. 87–101, 2001.
- [31] Y.H. Dai and Y.X. Yuan, *Nonlinear Conjugate Gradient Methods*, Shanghai Scientific and Technical Publishers, Shanghai, 2000.
- [32] Y.H. Dai and Y.X. Yuan, "An efficient hybrid conjugate gradient method for unconstrained optimization", *Annals Operational Research*, Volume 103, pp. 33–47, 2001.
- [33] Z.F. Dai and B.S. Tian, "Global convergence of some modified PRP nonlinear conjugate gradient methods", *Optimization Letters*, pp. 1–16, 2010.
- [34] G.B. Dantzig, *Linear Programming and Extensions*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1963.
- [35] W.C. Davidon, "Variable metric method for minimization", revised ANL5990, Argonne National Laboratory, Argonne, 1959.
- [36] W.C. Davidon, "Variable metric method for minimization", *SIAM Journal on Optimization*, Volume 1, pp. 1–17, 1991.
- [37] J.E. Dennis and R.B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, PA: SIAM, Philadelphia, 1996.
- [38] E. Dolan and J.J. Moré, "Benchmarking optimization software with performance profiles", *Mathematical Programming*, Volume 91, pp. 201–213, 2002.
- [39] S.Q. Du and Y.Y. Chen, "Global convergence of a modified spectral FR conjugate gradient method", *Applied Mathematics and Computation*, Volume 202, No. 2, pp. 766–770, 2008.
- [40] G. Fasano and M. Roma, "Iterative computation of negative curvature directions in large scale optimization", *Computational Optimization and Applications*, Volume 38, No. 1, pp. 81–104, 2007.
- [41] W.M. Faucette, "A geometric interpretation of the solution of the general quartic polynomial", *American Mathematical Monthly*, Volume 103, No. 1, pp. 51–57, 1996.
- [42] M.C. Ferris, S. Lucidi, and M. Roma, "Nonmonotone curvilinear line search methods for unconstrained optimization", *Computational Optimization and Applications*, Volume 6, pp. 117–136, 1996.
- [43] A.V. Fiacco and G.P. McCormick, *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, Wiley, New York, 1968.
- [44] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, John Wiley and Sons, New York, 2nd edition, 1997.
- [45] R. Fletcher and C.M. Reeves, "Function minimization by conjugate gradients", *Computer Journal*, Volume 7, pp. 149–154, 1964.
- [46] J.A. Ford and I.A. Moghrabi, "Multi-step Quasi-Newton methods for optimization", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 50, pp. 305–323, 1994.

- [47] J.A. Ford and I.A. Moghrabi, "Using function-values multi-step Quasi-Newton methods", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 66, pp. 201–211, 1996.
- [48] J.A. Ford, Y. Narushima, and H. Yabe, "Multi-step nonlinear conjugate gradient methods for unconstrained minimization", *Computational Optimization and Applications*, Volume 40, pp. 191–216, 2008.
- [49] J.Ch. Gilbert and X. Jonsson, "LIBOPT-An enviroment for testing solvers on heterogeneous collections of problems - version 1", CoRR, abs/cs/0703025, 2007.
- [50] J.C. Gilbert and J. Nocedal, "Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization", *SIAM Journal of Optimization*, Volume 2, No. 1, pp. 21–42, 1992.
- [51] D. Goldfarb, "Curvilinear path steplength algorithms for minimization which use directions of negative curvature", *Mathematical Programming*, Volume 18, pp. 31–40, 1980.
- [52] G.H. Golub and C.G. Van Loan, *Matrix Computation*, University Press, Johns Hopkins, Baltimore, 1996.
- [53] M. Gori and A. Tesi, "On the problem of local minima in backpropagation", *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Volume 14, No. 1, pp. 76–86, 1992.
- [54] R.P. Gorman and T.J. Sejnowski, "Analysis of hidden units in a layered network trained to classify sonar targets", *Neural Networks*, Volume Neural Networks, pp. 75–89, 1988.
- [55] N.I.M. Gould, S. Lucidi, M. Roma, and Ph.L. Toint, "Exploiting negative curvature directions in linesearch methods for unconstrained optimization", *Optimization Methods and Software*, Volume 14, pp. 75–98, 2000.
- [56] N.I.M. Gould, D. Orban, and Ph.L. Toint, "CUTer (and SifDec): A constrained and unconstrained testing enviroment, revised", *ACM Transactions on Mathematical Software*, Volume 29, No. 4, 2003.
- [57] M.T. Hagan, H.B. Demuth, and M. Beale, *Neural Network Design*, PWS Publishing Company, Boston, 1996.
- [58] W.W. Hager and H. Zhang, "A new conjugate gradient method with guaranteed descent and an efficient line search", *SIAM of Journal Optimization*, Volume 16, pp. 170–192, 2005.
- [59] W.W. Hager and H. Zhang, "CG DESCENT: A conjugate gradient method with guarantee descent and an efficient line search", *ACM Transactions on Mathematical Software*, Volume 32, pp. 113–137, 2006.
- [60] W.W. Hager and H. Zhang, "A survey of nonlinear conjugate gradient methods", *Pacific of Journal Optimization*, Volume 2, pp. 35–58, 2006.
- [61] S. Haykin, *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*, Macmillan College Publishing Company, New York, 1994.
- [62] J. Hertz, A. Krogh, and R. Palmer, *Introduction to the Theory of Neural Computation*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1991.
- [63] M.R. Hestenes, *Conjugate Direction Methods in Optimization*, Springer-Verlag, New York, 1980.

- [64] M.R. Hestenes and E. Stiefel, "Methods for conjugate gradients for solving linear systems", *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, Volume 49, pp. 409–436, 1952.
- [65] R. Horst and P.M. Pardalos, *Handbook of Global Optimization*, Kluwer Academic Publishers, London, 1995.
- [66] R. Horst and H. Tuy, *Global Optimization: Deterministic Approaches*, Springer, New York, 1996.
- [67] P. Horton and K. Nakai, "Better prediction of protein cellular localization sites with the k-Nearest Neighbors classifier", *In the Proceedings of the Intelligent Systems in Molecular Biology*, pp. 368–383, 1997.
- [68] I. Ipsen, "Computing an eigenvector with inverse iteration", *SIAM Review*, Volume 39, No. 2, pp. 254–291, 1997.
- [69] R. Kohavi, "A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection", *In the Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Artificial Intelligence*, AAAI Press and MIT Press, pp. 223–228, 1995.
- [70] Y. Lee, S.H. Oh, and M.W. Kim, "An analysis of premature saturation in backpropagation learning", *Neural Networks*, Volume 6, pp. 719–728, 1993.
- [71] D.H. Li and M. Fukushima, "A modified BFGS method and its global convergence in nonconvex minimization", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 129, pp. 15–35, 2001.
- [72] D.H. Li and M. Fukushima, "On the global convergence of the BFGS method for nonconvex unconstrained optimization problems", *SIAM Journal on Optimization*, Volume 11, pp. 1054–1064, 2001.
- [73] G. Li, C. Tang, and Z. Wei, "New conjugacy condition and related new conjugate gradient methods for unconstrained optimization", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 202, pp. 523–539, 2007.
- [74] I.S. Lim, P.H. Ciechomski, S. Sarni, and D. Thalmann, "Planar arrangement of high-dimensional biomedical data sets by isomap coordinates", *In the Proceedings of the 16th IEEE Symposium on Computer-Based Medical Systems*, pp. 50–55, 2003.
- [75] D.C. Liu and J. Nocedal, "On the limited memory BFGS method for large scale optimization methods", *Mathematical Programming*, Volume 45, pp. 503–528, 1989.
- [76] I.E. Livieris, M.S. Apostolopoulou, D.G. Sotiropoulos, S. Sioutas, and P. Pintelas, "Classification of large biomedical data using ANNs based on BFGS method", *In the Proceedings of the 13th Panellenic Conference of Informatics*, pp. 87–91, 2009.
- [77] I.E. Livieris and P. Pintelas, "A survey of algorithms for neural network training", Technical Report TR08-01, Department of Mathematics, University of Patras, 2008.
- [78] I.E. Livieris and P. Pintelas, "Performance evaluation of descent CG methods for neural network training", *In the Proceedings of the 9th Hellenic European Research on Computer Mathematics & its Applications Conference (HERCMA'09)*, edited by E. Lipitakis, pp. 40–46, 2009.
- [79] I.E. Livieris and P. Pintelas, "An advanced conjugate gradient training algorithm based on a modified secant equation", *ISRN Artificial Intelligence*, 2012.
- [80] I.E. Livieris and P. Pintelas, "A descent Dai-Liao conjugate gradient method based on a modified secant equation and its global convergence", *ISRN Computational Mathematics*, 2012.

- [81] I.E. Livieris and P. Pintelas, “An improved spectral conjugate gradient neural network training algorithm”, *International Journal on Artificial Intelligence Tools*, Volume 21, No. 1, 2012.
- [82] I.E. Livieris and P. Pintelas, “Globally convergent modified Perry conjugate gradient method”, *Applied Mathematics and Computation*, Volume 218, No. 18, pp. 9197–9207, 2012.
- [83] I.E. Livieris, D.G. Sotiropoulos, and P. Pintelas, “On descent spectral CG algorithms for training recurrent neural networks”, *In the Proceedings of the 13th Panellenic Conference of Informatics*, pp. 65–69, 2009.
- [84] A. Lu, H. Liu, X. Zheng, and W. Cong, “A variant spectral-type FR conjugate gradient method and its global convergence”, *Applied Mathematics and Computation*, Volume 217, No. 12, pp. 5547–5552, 2011.
- [85] S. Lucidi, F. Rochetich, and M. Roma, “Curvilinear stabilization techniques for truncated newton methods in large scale unconstrained optimization”, *SIAM Journal on Optimization*, Volume 8, No. 4, pp. 916–939, 1998.
- [86] S. Lucidi and M. Roma, “Numerical experiences with new truncated Newton methods in large scale unconstrained optimization”, *Computation Optimization and Applications*, Volume 7, pp. 71–87, 1997.
- [87] D. Luenberger, *Linear and NonLinear Programming*, Addition-Wesley, Massachusetts, 2nd edition, 1984.
- [88] G.D. Magoulas, M.N. Vrahatis, and G.S. Androulakis, “Effective backpropagation with variable stepsize”, *Neural Networks*, Volume 10, pp. 69–82, 1997.
- [89] D.P. Mandic and J.A. Chambers, *Recurrent Neural Networks for Prediction: Learning Algorithms, Architectures and Stability*, John Wiley and Sons, New York, NY, 2001.
- [90] G. McCormick, “A modification of Armijo’s step-size rule for negative curvature”, *Mathematical Programming*, Volume 13, pp. 111–115, 1977.
- [91] W.S. McCulloch and W. Pitts, “A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity”, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, Volume 5, pp. 115–133, 1943.
- [92] J.M. Mendel and R.W. McLaren, *Reinforcement Learning Control and Pattern Recognition Systems*, In *Adaptive Learning and Recognition Systems: Theory and Applications*, edited by J.M. Mendel and K.S. Fu, Academic Press, New York, pp. 287–318, 1970.
- [93] M. Minsky, “Steps toward artificial intelligence”, *In the Proceedings of the Computers and Thought*, McGraw-Hill, pp. 406–450, 1961.
- [94] M.F. Moller, “A scaled conjugate gradient algorithm for fast supervised learning”, *Neural Networks*, Volume 6, pp. 525–533, 1993.
- [95] J.J. Moré and D. Sorensen, “On the use of directions of negative curvature in a modified Newton method”, *Mathematical Programming*, Volume 16, pp. 1–20, 1979.
- [96] J.J. Moré and D.J. Thuente, “Line search algorithms with guaranteed sufficient decrease”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, Volume 20, No. 3, pp. 286–307, 1994.
- [97] P.M. Murphy and D.W. Aha, “UCI repository of machine learning databases”, Irvine, CA: University of California, Department of Information and Computer Science, 1994.
- [98] B.K. Natarajan, *Machine Learning: A Theoretical Approach*, Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1991.

- [99] D. Nguyen and B. Widrow, "Improving the learning speed of 2-layer neural network by choosing initial values of adaptive weights", *Biological Cybernetics*, Volume 59, pp. 71–113, 1990.
- [100] J. Nocedal, "Updating Quasi-Newton matrices with limited storage", *Mathematical Computing*, Volume 35, No. 151, pp. 773–782, 1980.
- [101] J. Nocedal, "Theory of algorithms for unconstrained optimization", *Acta Numerica*, Volume 1, pp. 199–242, 1992.
- [102] J. Nocedal and S.J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer-Verlag, New York, 1999.
- [103] A. Olivares, J.M. Moguerza, and F.J. Prieto, "Nonconvex optimization using negative curvature within a modified linesearch", *European Journal of Operational Research*, Volume 189, No. 3, pp. 706–722, 2008.
- [104] D.B. Parker, "Optimal algorithms for adaptive networks: Second-order backpropagation, second order direct propagation and second order Hebbian learning", *In the Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks*, Volume 2, pp. 593–600, 1987.
- [105] C.C. Peng, and G.D. Magoulas, "Advanced Adaptive Nonmonotone Conjugate Gradient Training Algorithm for Recurrent Neural Networks", *International Journal on Artificial Intelligence Toolsh*, Volume 17, pp. 963–984, 2008.
- [106] A. Perry, "A modified conjugate gradient algorithm", *Operational Research*, Volume 26, pp. 1073–1078, 1978.
- [107] J.D. Pintér, *Global Optimization in Action*, Academic Publishers, 1996.
- [108] V.P. Plagianakos, D.G. Sotiropoulos, and M.N. Vrahatis, "Automatic adaptation of learning rate for backpropagation neural networks", *In the Proceedings of the Recent Advantages in Circuits and Systems*, edited by N. Mastorakis, Singapore, pp. 337–341, 1998.
- [109] V.P. Plagianakos, M.N. Vrahatis, and G.D. Magoulas, "Nonmonotone methods backpropagation training with adaptive learning rate", *In the Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Neural Networks*, Volume 3, Washington D.C., pp. 1762–1767, 1999.
- [110] E. Polak and G. Ribière, "Note sur la convergence de methods de directions conjuguées", *Revue Francais d'Informatique et de Recherche Operationnelle*, Volume 16, pp. 35–43, 1969.
- [111] S.L. Pomeroy, P. P. Tamayo, M. Gaasenbeek, L.M Sturla, M. Angelo, M.E. McLoughlin, J.Y. Kim, L.C. Goumnerova, P.M. Black, C. Lau, J.C. Allen, D. Zagzag, J.M. Olson, T. Curran, C. Wetmore, J.A. Biegel, T. Poggio, S. Mukherjee, R. Rifkin, A. Califano, G. Stolovitzky, D.N. Louis, J.P. Mesirov, E.S. Lander, and T.R. Golub, "Prediction of central nervous system embryonal tumour outcome based on gene expression", *Nature*, Volume 415, pp. 436–442, 2002.
- [112] M.J.D. Powell, "A new algorithm for unconstrained optimization", *In Nonlinear Programming*, edited by J. Rosen, O. Mangasarian, and K. Ritter, Academic Press, New York, NY, pp. 31–66, 1970.
- [113] M.J.D. Powell, "Restart procedures for the conjugate gradient method", *Mathematical Programming*, Volume 12, pp. 241–254, 1977.

- [114] M.J.D. Powell, "Nonconvex minimization calculations and the conjugate gradient method", In *Numerical Analysis*, Volume 1066 of *Lecture Notes in Mathematics*, Springer Verlag, Berlin, pp. 122-141, 1984.
- [115] L. Prechelt, "PROBEN1-A set of benchmarks and benchmarking rules for neural network training algorithms", Technical Report 21/94, Fakultt fr Informatik, University of Karlsruhe, 1994.
- [116] S.S. Rao, *Optimization: Theory and Applications*, Wiley, Eastern Limited, New Delhi, 2nd edition, 1984.
- [117] D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, and R.J. Williams, "Learning internal representations by error propagation", In *the Proceedings of the Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*, edited by D. Rumelhart and J. McClelland, Cambridge, Massachusetts, pp. 318-362, 1986.
- [118] D.E Rumelhart and J.L. McClelland, *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition*, MA: MIT Press, Cambridge, 1986.
- [119] D.F. Shanno and K.H. Phua, "Minimization of unconstrained multivariate functions", *ACM Transactions on Mathematical Software*, Volume 2, pp. 87-94, 1976.
- [120] G.M. Shepherd and C. Koch, *Introduction to synaptic circuits*, In *The Synaptic Organization of the Brain*, edited by G.M. Shepherd, Oxford University Press, New York, pp. 3-31, 1990.
- [121] M.A. Shipp, K.N. Ross, P. Tamayo, A.P. Weng, J.L. Kutok, R.C. Aguiar, M. Gaasenbeek, M. Angelo, M. Reich, G.S. Pinkus, T.S. Ray, M.A. Koval, K.W. Last, A. Norton, T.A. Lister, J. Mesirov, D.S. Neuberg, E.S. Lander, J.C. Aster, and T.R. Golub, "Diffuse large b-cell lymphoma outcome prediction by gene-expression profiling and supervised machine learning", *Nature Medicine*, Volume 8, No. 1, pp. 68-74, 2002.
- [122] D. Singh, P.G. Febbo, K. Ross, D.G. Jackson, J. Manola, C. Ladd, P. Tamayo, A.A. Renshaw, A.V. D'Amico, J.P. Richie, E.S. Lander, M. Loda, P.W. Kantoff, T.R. Golub, and W.R. Sellers, "Gene expression correlates of clinical prostate cancer behavior", *Cancer Cell*, Volume 1, pp. 203-209, 2002.
- [123] D.G. Sotiropoulos, A. Kostopoulos, and T.N. Grapsa, "A spectral version of Perry's conjugate gradient method for neural network training", In *the Proceedings of the 4th GRACM Congress on Computational Mechanics*, pp. 291-298, 2002.
- [124] W. Sun and Y. Yuan, *Optimization Theory and Methods*, Springer, New York, 2006.
- [125] L.J.P. Van der Maaten and H.J. Van den Herik, "Dimensionality reduction: A comparative review", *Submitted to Neurocomputing*, 2008.
- [126] T.P. Vogl, J.K. Mangis, J.K. Rigler, W.T. Zink, and D.L. Alkon, "Accelerating the convergence of the backpropagation method", *Biological Cybernetics*, Volume 59, pp. 257-263, 1988.
- [127] M.N. Vrahatis, G.S. Androulakis, J.N. Lambrinos, and G.D. Magoulas, "A class of gradient unconstrained minimization algorithms with adaptive stepsize", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 114, No. 2, pp. 367-386, 2000.
- [128] Z. Wei, G. Li, and L. Qi, "New Quasi-Newton methods for unconstrained optimization problems", *Applied Mathematics and Computation*, Volume 175, pp. 1156-1188, 2006.

- [129] B. Widrow and M.E. Hoff, "Adaptive switching circuits", *IRE WESCON Convention Record*, Volume 4, pp. 96–104, 1960.
- [130] H. Wielandt, *Mathematische Werke/Mathematical works*, Walter de Gruyter & Co., Berlin, 1996.
- [131] P. Wolfe, "Convergence conditions for ascent methods", *SIAM Review*, Volume 11, pp. 226–235, 1969.
- [132] P. Wolfe, "Convergence conditions for ascent methods", *SIAM Review*, Volume 13, pp. 185–188, 1971.
- [133] H. Yabe and M. Takano, "Global convergence properties of nonlinear conjugate gradient methods with modified secant condition", *Computational Optimization and Applications*, Volume 28, pp. 203–225, 2004.
- [134] G.H. Yu, *Nonlinear self-scaling conjugate gradient methods for large-scale optimization problems*, Ph.D. Thesis, Sun Yat-Sen University, 2007.
- [135] G. Yu, L. Guan, and W. Chen, "Spectral conjugate gradient methods with sufficient descent property for large-scale unconstrained optimization", *Optimization Methods and Software*, Volume 23, No. 2, pp. 275–293, 2008.
- [136] J. Yu, S. Wang, and L. Xi, "Evolving artificial neural networks using an improved PSO and DPSO", *Neurocomputing*, Volume 71, pp. 1054–1060, 2008.
- [137] G. Yuan, "Modified nonlinear conjugate gradient methods with sufficient descent property for large-scale optimization problems", *Optimization Letters*, Volume 3, pp. 11–21, 2009.
- [138] J.Z. Zhang, N.Y. Deng, and L.H. Chen, "New Quasi-Newton equation and related methods for unconstrained optimization", *Journal of Optimization Theory and Applications*, Volume 102, pp. 147–167, 1999.
- [139] J.Z. Zhang and C.X. Xu, "Properties and numerical performance of Quasi-Newton methods with modified Quasi-Newton equations", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 137, pp. 269–278, 2001.
- [140] L. Zhang, "Two modified Dai-Yuan nonlinear conjugate gradient methods", *Numerical Algorithms*, Volume 50, pp. 1–16, 2009.
- [141] L. Zhang and W. Zhou, "Two descent hybrid conjugate gradient methods for optimization", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 216, pp. 251–264, 2008.
- [142] L. Zhang, W. Zhou, and D. Li, "Global convergence of a modified Fletcher-Reeves conjugate gradient method with Armijo-type line search", *Numerische Mathematik*, Volume 104, pp. 561–572, 2006.
- [143] L. Zhang, W. Zhou, and D. Li, "Some descent three-term conjugate gradient methods and their global convergence", *Optimization Methods and Software*, Volume 22, pp. 697–711, 2007.
- [144] M. Zhang and P. Wong, "Genetic programming for medical classification: a program simplification approach", *Genetic Programming and Evolvable Machines*, Volume 9, pp. 229–255, 2008.

- [145] B. Zhou, L. Gao, and Y.H. Dai, “Gradient methods with adaptive step-sizes”, *Computational Optimization and Applications*, Volume 35, pp. 69–86, 2006.
- [146] W. Zhou and L. Zhang, “A nonlinear conjugate gradient method based on the MBFGS secant condition”, *Optimization Methods and Software*, Volume 21, No. 5, pp. 707–714, 2006.
- [147] G. Zoutendijk, “Nonlinear programming”, *In the Proceedings of the Integer and Nonlinear Programming*, edited by J. Abadie, North Holland, Amsterdam, pp. 37–86, 1970.
- [148] Μ.Σ. Αποστολοπούλου, *Μαθηματικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης Προβλημάτων Μεγάλης Κλίμακας*, Διδακτορική Διατριβή, Πανεπιστήμιο Πατρών, 2011.
- [149] Π. Αργυράκης, *Νευρωνικά Δίκτυα και Εφαρμογές*, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Πάτρα, 2001.
- [150] Μ.Ν. Βραχάτης, *Αριθμητική Επίλυση Μη-Γραμμικών, Αλγεβρικών και Υπερβατικών Εξισώσεων*, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, 1999.
- [151] Β.Π. Πλαγιανάκος, *Νέες Μέθοδοι για την Εκπαίδευση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων, Βελτιστοποίησης και Εφαρμογές*, Διδακτορική Διατριβή, Πανεπιστήμιο Πατρών, 2002.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ,
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ,
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ,