ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΚΑΙ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΘΕΜΑ: ΧΡΗΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΤΟΥ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ ΣΤΗΝ ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΤΗΣ ΚΟΙΛΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΙΣΟΤΟΝΙΚΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ.

ΣΕΡΑΦΕΙΜ ΜΠΑΧΑΤΙΡΟΓΛΟΥ
Α.Μ. 423

Επιβλέπων Καθηγητής: Μ. Μιχαλόπουλος

Χανιά 1994

Ευχαριστώ τον κ. Μ.Μιχαλόπουλο για τις συμβουλές και επισημάνσεις του κατά την διάρκεια της εργασίας.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μεθοδολογία της ισοτονικής παλινδρόμησης εφαρμόζεται στην επίλυση ενός μεγάλου αριθμού προβλημάτων στατιστικής που χαρακτηρίζονται από την ύπαρξη πληροφοριών με μη ποσοτικό χαρακτήρα (ordinal) και οι οποίες είναι γνωστές εκ των προτέρων και λαμβάνονται υπ' οψη στις διάφορες φάσεις της εκτίμησης των παραμέτρων του μοντέλου και του ελέγχου των υποθέσεων. Στα πλαίσια της ανάλυσης δεδομένων αυτή η μεθοδολογία αποτελεί βάση των τεχνικών βέλτιστης Κωδικοποίησης, με πλέον χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτό της Πολυδιάστατης Κλιμακοποίησης (Multidimensional Scaling) [20,14].

Στην απλή της μορφή, η ισοτονική παλινδρόμηση επεξεργάζεται το ακόλουθο στατιστικό πρόβλημα :

Θεωρούμε την επόμενη στατιστική δομή που αντιστοιχεί στην σύγκριση n πληθυσμών που γίνεται με την βοήθεια δειγμάτων με αντίστοιχο μέγεθος n_i

$$\prod_{i=1}^{n} (\mathbb{R}^{n}, \mathcal{B}_{\mathbb{R}}, P_i)^{*n_i} .$$

όπου P_i ακολουθεί Κανονική κατανομή με μέση τιμή μ_i και γνωστή διασπορά σ_i. Υποθέτουμε επιπλέον ότι δίνεται μια σχέση διάταξης μεταξύ των πληθυσμών που χαρακτηρίζεται από την σχέση $\mu_i \leq \mu_{i+1}$ για $i=1,2,\ldots,n-1$.

Το πρόβλημα λοιπόν συνίσταται στο να εκτιμηθούν οι μέσοι μ_i με το κριτήριο της μέγιστης πιθανοφάνειας. Το πρόβλημα αυτό εκφράζεται ως:

$$\prod_{i=1}^{n} \frac{\sqrt{n_i}}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_i} \operatorname{Exp}\left(\frac{-n_i}{2} \, \frac{(g_i-\mu_i)^2}{\sigma_i^2} \right).$$

υπό τους περιορισμούς $\mu_i \leq \mu_{i+1}$ για $i=1,2,\ldots,n-1$.

Το πρόβλημα αυτό είναι ισοδύναμο με το επόμενο πρόβλημα της παλινδρόμησης με την μορφή των ελαχίστων τετραγώνων

$$\min \sum_{i=1}^{n} w_i (g_i-\mu_i)^2$$

και με τους περιορισμούς $\mu_i \leq \mu_{i+1}$ για $i=1,2,...,n-1$. Οι περιορισμοί αυτοί εκφράζουν το γεγονός ότι η συνάρτηση $\mu=(\mu_1, \mu_2, ..., \mu_n)$ είναι μια συνάρτηση ισοτονική επί του συνόλου $A=\{1,2,...,n\}$ όπου η σχέση διατάξεως είναι η φυσική διάταξη επί των ακεραίων. Οι ανάγκες της στατιστικής μοντελοποίησης στην οικονομετρία, οδηγούν στην επέκταση των περιορισμών αυτών στους περιορισμούς κοιλότητας. Ετσι το πρόβλημα της κοίλης παλινδρόμησης εκφράζεται ως ακολούθως:

$$\sum_{i=1}^{n} w_i (g_i - x_i)^2$$

με περιορισμούς κοιλότητας

$$\frac{x_{i+2}-x_{i+1}}{y_{i+2}-y_{i+1}} \leq \frac{x_{i+1}-x_i}{y_{i+1}-y_i} \quad ; \; i=1,2,......,n\text{-}2.$$

όπου οι μεταβλητές y_i , $i=1,2,...,n$ είναι τέτοιες ώστε $0<y_1<y_2<...<y_n$.

Για τα προβλήματα παλινδρόμησης θα ακολουθηθούν τρεις μέθοδοι προσέγγισης: η μέθοδος Dykstra, η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού και η τροποποιημένη μέθοδος υποδιαφορικού. Οι δύο τελευταίες επιλύουν τις εφαρμογές του δυικού προβλήματος του τετραγωνικού προγραμματισμού για την ισοτονική και την κοίλη παλινδρόμηση.

Στη γενική περίπτωση παλινδρομήσεων, η δομή είναι τέτοια που επιτρέπει την διατύπωση απλών αλγορίθμων, οι οποίοι όμως, δεν δίνουν ικανοποιητικά αποτελέσματα για την κοίλη παλινδρόμηση καθώς και για την παλινδρόμηση με μερική διάταξη. Αυτό το κενό έρχεται να καλύψει ο Dykstra με την μέθοδο που θα περιγραφεί.

Τα προβλήματα της ισοτονικής και της κοίλης παλινδρόμησης όμως, μπορεί να θεωρηθούν με απλό μετασχηματισμό ως προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού. Η επίλυση αυτών πραγματοποιείται με μια παραλλαγή της μεθόδου των συζυγών διευθύνσεων που φέρει το όνομα "Μέθοδος του συζυγούς διαφορικού". Για να απλοποιηθεί η επίλυση των προβλημάτων παλινδρόμησης χρησιμοποιείται το δυϊκό πρόβλημα τετραγωνικού πλεονεκτήματα γιατί έχει λιγότερες μεταβλητές και λύνεται με την μέθοδο του συζυγούς διαφορικού που εφαρμόζεται με απλό τρόπο [4,9,11,13,18,19,23].

Η τελευταία προσέγγιση η οποία θα χρησιμοποιηθεί, είναι η τροποποιημένη μέθοδος υποδιαφορικού, η οποία είναι μία μέθοδος nonsmooth βελτιστοποίησης. Δηλαδή ασχολείται με προβλήματα βελτιστοποίησης στα οποία η συνάρτηση έχει ασυνεχή πρώτη παράγωγο και εξαιτίας αυτού οι κλασσικές μέθοδοι αποτυγχάνουν.

Η διάρθρωση της εργασίας που ακολουθεί, είναι η εξής:

Στο πρώτο κεφάλαιο λοιπόν, θα αναπτυχθεί η μέθοδος του Dykstra και η εφαρμογή αυτής στην κοίλη και στην ισοτονική παλινδρόμηση με μερική και ολική διάταξη.

Στο δεύτερο κεφάλαιο περιγράφεται η επίλυση της μεθόδου του τετραγωνικού προγραμματισμού καθώς και του δυϊκού προβλήματος αυτού με την μέθοδο του συζυγούς διαφορικού. Στη συνέχεια, το πρόβλημα της ισοτονικής και κοίλης παλινδρόμησης ανάγεται σε πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού με περιορισμούς γραμμικότητας, το οποίο επιλύουμε με την ίδια μέθοδο.

Το τρίτο κεφάλαιο ασχολείται με την τροποποιημένη μέθοδο του υποδιαφορικού η οποία επιλύει το δυικό πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού. Στην συνέχεια γίνεται εφαρμογή και μοντελοποίηση αυτής της μεθόδου για την ισοτονική και την κοίλη παλινδρόμηση.

Στο τέταρτο κεφάλαιο συγκρίνονται τα αποτελέσματα που δίνουν οι παραπάνω μέθοδοι για την ισότονη και την κοίλη παλινδρόμηση.

Τέλος, στο παράρτημα που ακολουθεί, υπάρχει η εκτύπωση όλων των προγραμμάτων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1. Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ DYKSTRA

Στην προσπάθειά του ο Dykstra να κατασκευάσει λύση για τα προβλήματα παλινδρόμησης, τα παρουσίασε ως προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων υπό ανισωτικούς γραμμικούς περιορισμούς. Ετσι το πρόβλημα καταλήγει στο να αναζητηθεί η προβολή ενός σημείου στην τομή των κώνων που ορίζονται από το σύνολο των περιορισμών. Ο Dykstra τυποποιώντας κατ' αυτό τον τρόπο το πρόβλημα δινει μια μέθοδο στην οποία υπεισέρχεται σε κάθε βήμα του αλγορίθμου μόνο ένας κώνος. Κατά συνέπεια ο αλγόριθμος αυτός επεξεργάζεται κώνους απλούς στην περιγραφή [7,21,22].

1.1. Τοποθέτηση του προβλήματος.

Εστω g και w ($w_i > 0$) δεδομένα στοιχεία του R^n.

Ορίζεται το εσωτερικό γινόμενο του x με το y (σχετικό με τα βάρη w_i) ως εξής:

$$<x,y> = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i y_i$$

Η προσαρτημένη νόρμα σ' αυτό το εσωτερικό γινόμενο δίνεται από:

$$\|x\|^2 = <x,x> = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i^2$$

και το πρόβλημα συνίσταται στην ελαχιστοποίηση της

$$f(x) = 1/2\|g-x\|^2 \qquad (1.1)$$

Με τους περιορισμούς

$$x \in \bigcap_{i=1}^{m} C_i \qquad (1.2)$$

όπου το X ανήκει στην τομή των κώνων C_i. Οι κώνοι C_i ορίζονται κάθε φορά από τους περιορισμούς του προβλήματος.

1.2. Περιγραφή του αλγορίθμου.

Ορίζεται η προβολή του x στο C_i με $P(x/C_i)$ και για κάθε ακέραιο θετικό n τίθεται nmodm=i αν n=kr+i με $1 \leq i \leq m$.

Αρχή του αλγορίθμου: Εστω $g_0=g$, $I_0=0$, i=1,2,...,m και n=1.

Νιοστό βήμα: Ο αλγόριθμος συνθέτει τις προβολές επί του κώνου C_1 που λαμβάνονται ως εξής.

1) Εστω $g_{1,1}$ παριστάνει την προβολή του g στον κώνο C_1. Ορίζεται ως $I_{1,1}= g_{1,1}-g$ ο παράγοντας της dicrementation.

2) Εστω $g_{1,2}$ η προβολή του $g+I_{1,1} = g_{1,1}$ επί του C_2. Ο παράγοντας incrementation γίνεται λοιπόν

$$I_{1,2}=g_{1,2}-g_{1,1}=g_{1,2}-(g+I_{1,1})$$

και κατά συνέπεια:

$$g_{1,2}=g+I_{1,1}+I_{1,2}$$

3) Εστω $g_{1,3}$ η προβολή του

$$g_{1,2}=g+I_{1,1}+I_{1,2}$$

στο C_3. Ο παράγοντας incrementation γίνεται

$$l_{1,3}=g_{1,3}-g_{1,2}=g_{1,3}-(g+l_{1,1}+l_{1,2})$$

που δίνει την

$$g_{1,3}=g+l_{1,1}+l_{1,2}+l_{1,3}.$$

4) Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι την $g_{1,m}$ και

$$l_{1,m}=g_{1,r}-(g+l_{1,1}+\dots\dots\dots+l_{1,m-1})$$

Εστω $g_{2,1}$ η προβολή του ($g_{1,m}$ - $l_{1,1}$) επί του C_1.

$$(g_{1,m}-l_{1,1})=(g+l_{1,2}+\dots\dots\dots+l_{1,m})$$

και επομένως

$$g_{2,1}=P(g+l_{1,2}+\dots\dots\dots+l_{1,m}/C_1)$$

$$l_{2,1}=g_{2,1}-g_{1,m}=g_{2,1}-(g+l_{1,2}+\dots\dots\dots+l_{1,m})$$

$$g_{2,1}=g+l_{2,1}+l_{1,2}+\dots\dots\dots+l_{1,m}.$$

Παρατηρείται ότι προβάλλοντας κυκλικά επί του κώνου, το $g_{n,i}$ είναι η προβολή του

$$g + I_{n,1} + \dots + I_{n,i-1} + I_{n-1,i+1} + \dots\dots\dots\dots + I_{n-1,m}$$

επί της i τάξεως κώνου κατά τη διάρκεια του νιοστού κύκλου. Ετσι γενικά το $g_{n,i}$ είναι η προβολή του

$$g + I_{n,1} + \dots + I_{n,i-1} + I_{n-1,i+1} + \dots\dots\dots\dots + I_{n-1,m}$$

επί του κώνου C_i και ο παράγοντας incrementation γίνεται

$$I_{n,i} = g_{n,i} - (g + I_{n,1} + \dots + I_{n,i-1} + I_{n-1,i+1} + \dots\dots\dots\dots + I_{n-1,m})$$

Στη συνέχεια η πρόοδος του αλγορίθμου είναι:

1) Εστω

$$g_n = P(g_{n-1} - I_{nmodm}/C_{nmodm})$$

και υπολογίζεται το I_{nmodm} παίρνοντάς το ίσο με

$$g_n - (g_{n-1} - I_{nmodm}).$$

2) Αντικαθίσταται το n από το n+1 και ξαναρχίζει η διαδικασία από το i.

Θεώρημα 1.1 [6]

Τα διανύσματα $g_{n,i}$ για $i=1,2,\ldots, m$, συγκλίνουν στη λύση του προβλήματος (1.1), (1.2.), όταν $n \to \infty$.

1.3. Εφαρμογές μεθόδων Dykstra.

1.3.1. Ισοτονική παλινδρόμηση.

Στην ισοτονικη παλινδρομηση οι περιορισμοι εχουν την ακολουθη μορφη:

$$x_i - x_{i+1} \le 0 \quad i=1,2,\ldots\ldots,n-1.$$

Θέτοντας

$$C_i = \{ x \in \mathbb{R}^n : \quad x_i - x_{i+1} \le 0 \}.$$

Η προβολή g στο C_i δίνεται από :

$$P(g/C_i) = \begin{cases} g & g_i - g_{i+1} \le 0 \\ \left(g_1, g_2, \ldots\ldots, g_{i-1}, \dfrac{g_i w_i + g_{i+1} w_{i+1}}{w_i + w_{i+1}}, \dfrac{g_i w_i + g_{i+1} w_{i+1}}{w_i + w_{i+1}}, g_{i+2}, \ldots\ldots, g_n\right) & g_i - g_{i+1} > 0 \end{cases}$$

1.3.2. Κοίλη παλινδρόμηση.

Το πρόβλημα είναι φυσική επέκταση του προηγούμενου προβλήματος. Είναι το αντικείμενο πολλών δημοσιεύσεων (HILDRETH 1954 , HANSON and PLENGER 1976, WU[22], R.DYKSTRA [6] , M.A.BOUGHAZI , PHAM DINH TAO[2]).

Δίνονται n διανύσματα με τετμημένες y_i , i=1,...,n τέτοιες ώστε $y_1 < y_2 < \dots < y_n$. Το πρόβλημα συνίσταται στο να ελαχιστοποιηθεί

$$\sum_{i=1}^{n} w_i(g_i - x_i)^2$$

με περιορισμούς κοιλότητας:

$$\frac{x_{i+2}-x_{i+1}}{y_{i+2}-y_{i+1}} \le \frac{x_{i+1}-x_i}{y_{i+1}-y_i} \quad ; \; i=1,2,\dots\dots,n-2.$$

θέτοντας για i=1,2,...,n-2.

$$C_i=\{x\in \mathbb{R}^n \; : \; \frac{x_{i+2}-x_{i+1}}{y_{i+2}-y_{i+1}} \le \frac{x_{i+1}-x_i}{y_{i+1}-y_i}\}$$

O C_i είναι κλειστός κώνος στο R^n. Μπορεί να υπολογιστεί η προβολή του g στους κώνους C_i με την έκφραση

$$[P_{C_i}(x)]_j = \begin{cases} x_i^* + b_i^*(y_j - y_i^*) & j=i,\ i+1,\ i+2 \\ x_j & j\neq i,\ i+1,\ i+2 \end{cases}$$

όπου

$$x_i^* = \frac{\sum_{j=i}^{i+2} x_j w_j}{\sum_{j=i}^{i+2} w_j}$$

$$y_i^* = \frac{\sum_{j=i}^{i+2} y_j w_j}{\sum_{j=i}^{i+2} w_j}$$

και

$$b_i^* = \frac{\sum_{j=i}^{i+2} (x_j - x_i^*) y_j w_j}{\sum_{j=i}^{i+2} (y_j - y_i^*)^2 w_j}$$

1.3.3. Ισοτονική παλινδρόμηση για μια γενική διάταξη.

Θεωρούμε το γενικό πρόβλημα παλινδρόμησης που περιλαμβάνει σαν ιδιαίτερη περίπτωση τα δύο προηγούμενα προβλήματα. Συνίσταται στην ελαχιστοποίηση του

$$\sum_{i=1}^{n} w_i (g_i - x_i)^2$$

με περιορισμούς

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leq 0 \qquad i=1,\dots,m.$$

Αν τεθεί

$$C_i=\{x\in \mathbb{R}^n \;;\; \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\leq 0 \;\} \qquad i=1,\ldots\ldots,m$$

για $i=1,..,m$, τότε η έκφραση της προβολής του g στο C_i είναι η παρακάτω:

$$P(g/C_i)=\begin{cases} g & \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\leq 0 \\ (g_1',g_2',\ldots\ldots,g_n') & \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j>0 \end{cases}$$

όπου

$$g_j'=g_j-\frac{\left(\sum_{k=1}^{n} g_k a_{ik}\right)a_{ij}w_j^{-1}}{\sum_{k=1}^{n} a_{ik}^2 w_k^{-1}} \qquad j=1,\ldots\ldots,n$$

Μοντελοποίηση της ισότονης παλινδρόμησης.

Κατά την μοντελοποίηση της μεθόδου Dykstra για την ισοτονική παλινδρόμηση, ακολουθούνται τα εξής στάδια:

A) Εισαγωγή του διανύσματος G και των βαρών $W(I)$.

B) Ελεγχος για το αν υπάρχει κάποιο $G(I)$ για το οποίο $G(I) > G(I+1)$. Αν ναι τότε μεταβάλλονται τα $G(I)$, $G(I+1)$ σύμφωνα με τον τύπο:

$$G(I) = G(I+1) = [\ G(I)*W(I) + G(I+1)*W(I+1)] \ / \ [\ W(I) + W(I+1)]$$

Γ) Οι νέες τιμές των $G(I)$ όμως μπορεί να διαταράξουν τη σχέση μεταξύ των $G(I)$ και $G(I-1)$, δηλαδή να οδηγήσει σ' ένα νέο $G(I)$ για το οποίο να ισχύει $G(I-1) > G(I)$. Γι' αυτό το λόγο θα πρέπει να ξαναρχίσει ο έλεγχος των συνιστωσών του διανύσματος G από $I=1$. Σε περίπτωση που υπάρχει διαταραχή στη σχέση του $G(I-1)$ με το $G(I)$, πάμε στο βήμα (B) και γίνεται αναπροσαρμογή των G ώστε τελικά να ληφθεί διάταξη της μορφής $G(1) < G(2) < \dots < G(N)$.

Δ) Ο αλγόριθμος σταματά και εμφανίζει τα βέλτιστα $X(I)=G(I)$ όταν για κάθε $I \in \{1,2,\dots,N-1\} \Rightarrow G(I) \leq G(I+1)$.

Μοντελοποίση της κοίλης παλινδρόμησης

Κατά την μοντελοποίηση της μεθόδου Dykstra για την κοίλη παλινδρόμηση ακολουθούνται τα εξής στάδια:

A) Εισαγωγή του διανύσματος G, των βαρών W(I) καθώς και των συνιστωσών Y(I), τέτοιων ώστε Y(1)<Y(2)<...<Y(N).

B) Ελεγχος κατά τριάδες των G(I) για το αν τηρούνται οι περιορισμοί κοιλότητας:

$$[\,(G(I+2)-G(I+1))\,/\,(Y(I+2)-Y(I+1))] \le [\,(G(I+1)-G(I))/(Y(I+1)-Y(I))] \qquad (2)$$

για I=1,2,...,N-2.

Σε περίπτωση που δεν ισχύει ο περιορισμός, γίνεται αναπροσαρμογή των G(I) σύμφωνα με τον τύπο:

$$G=X(I)+B(I)*(Y(J)-Y1(I))$$

όπου $X(I)=\sum_{J=i}^{i+2} G(J)*W(J)/\sum_{J=i}^{i+2} W(J)$

$$Y1(I)=\sum_{J=i}^{i+2} Y(J)*W(J)/\sum_{J=i}^{i+2} W(J)$$

$$B(I)=\sum_{J=i}^{i+2}(G(J)-X(I))*Y(J)*W(J)/\sum_{J=i}^{i+2}(Y(J)-Y1(I))**2*W(J)$$

Γ) Αυτή η αναπροσαρμογή όμως μπορεί να διαταράξει τη σχέση των G(I-1), G(I), G(I+1) στον μεταξύ τους περιορισμό, δηλαδή μπορεί να μεταβληθούν οι τιμές των G(I) και G(I+1) ώστε να μην ισχύει η σχέση

$$(G(I+1)-G(I))\,/\,(Y(I+1)-Y(I))] \le (G(I)-G(I-1))\,/\,(Y(I)-Y(I-1))$$

γι' αυτό πρέπει να ξαναρχίσει ο έλεγχος του βήματος B από I=1. Σε περίπτωση που διαπιστωθεί διαταραχή θα πρέπει να γίνει αναπροσαρμογή των συνιστωσών του G. Επειτα πάμε στο βήμα Γ, ώστε τελικά να ισχύει ο περιορισμός (1).

Δ) Ο αλγόριθμος σταματάει και μας εμφανίζει το βέλτιστο X(I) = G(I) όταν $\forall$ $I \in \{1,2,...,N-2\}$ ισχύει ο περιορισμός (1).

Μοντελοποίηση της ισοτονικής παλινδρόμησης για μερική διάταξη.

Κατά τη μοντελοποίηση της μεθόδου Dykstra για την κοίλη παλινδρόμηση με μερική διάταξη, ακολουθούνται τα εξής στάδια.

Α) Εισαγωγή του διανύσματος G, των βαρών W(I) καθώς και των συνιστωσών A(I,J) με τις οποίες η συνιστώσα X(J) μετέχει στον περιορισμό I..

Β) Ελεγχος για το αν ισχύουν οι σειρές περιορισμών $\sum_{J=1}^{n} A(I,J)*G(J) < 0$. Εστω ότι για κάποια σειρά περιορισμών I δεν ισχύει $\sum_{J=1}^{n} A(I,J)*X(J) < 0$. Τότε μεταβάλλεται η τιμή του G(J) σύμφωνα με τον τύπο

$G(J)=G(J)-[(\sum_{K=1}^{n} G(K)*A(I,K))*A(I,J)*W**-1)/ \sum_{K=1}^{n} A(I,K)**2*W(K)**-1]$ για J=1,2,...N. Αφού πάρουμε τις νέες τιμές G(J) ελέγχεται αν γι' αυτές ισχύει ο ίδιος περιορισμός.

Αν όχι, μεταβάλλονται ξανά τις τιμές G(J) σύμφωνα με τον προηγούμενο τύπο ώσπου να ληφθούν τιμές που να ικανοποιούν τον περιορισμό.

Γ) Εστω ότι βρισκόμαστε σε μία σειρά περιορισμών I=K και μετά την τελευταία αναπροσαρμογή έχουμε κάποιες τιμές G(J). Θα πρέπει να εξετασθούν αν αυτές οι τιμές G(J) ικανοποιούν την προηγούμενη (K-1) σειρά περιορισμών . Γι' αυτό το λόγο πάμε στο βήμα Β και ξαναρχίζουμε για I=1. Γίνονται συνεχώς αναπροσαρμογές του G εκεί που δεν ισχύουν οι περιορισμοί, έτσι ώστε στο τέλος να έχουμε τιμές που να ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\sum_{J=1}^{n} A(I,J)*X(J) < 0 \ , \ I=1,2,...M \ , \ J=1,2,...,N.$$

Δ) Η διαδικασία τελειώνει και εμφανίζονται τα βέλτιστα X(I)=G(I) όταν $\forall I \in \{1,2,..,M\}$ και $\forall J \in \{1,2,...,N\}$ ισχύουν οι περιορισμοί

$$\sum_{J=1}^{n} A(I,J)*G(J)<0.$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΗΣ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΔΙΑΦΟΡΙΚΟΥ

2.1. Το πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού.

Το πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού αναζητά το ελάχιστο μιας τετραγωνικής (δευτεροβάθμιας) συνάρτησης με γραμμικούς περιορισμούς. Ετσι το πρόβλημα συνίσταται στο να ελαχιστοποιηθεί η

$$f(x) = 1/2 \langle x, Cx \rangle + \langle x, d \rangle \qquad (2.1)$$

υπό τους περιορισμούς $\quad Ax \leq b \qquad (2.2)$

όπου $\quad n$ = αριθμός μεταβλητών

m = αριθμός περιορισμών

C = συμμετρικός πραγματικός $n \times n$ πίνακας θετικά ορισμένος

A = πραγματικός πίνακας $m \times n$ περιορισμών, ορισμένος ως

$A = [a_1, a_2, \ldots, a_m]^t$ όπου $a_i \in R^n$ και $x \in \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$.

$1 \leq i \leq m$,

Αυτός ο τύπος προβλημάτων αποτελεί αντικείμενο πολλών εργασιών (P.WOLFE, A.LENT and Y.CENSOR, C.HILDRETH[11] και G. ZOUTENDIJK [23]).

2.2. Αναγκαίες και ικανές συνθήκες βελτιστοποίησης.

Σημειώνεται με D το σύνολο των λύσεων που πραγματοποιούνται στο πρόβλημα (2.1) (2.2), δηλαδή :

$D = \{x \in \mathbb{R}^n \; ; \; \langle a_i, x \rangle \leq b_i \, , \; i = 1, \ldots\ldots, m\}$, $\qquad$ θέτουμε $\qquad I = \{1, 2, \ldots\ldots, m\}$.

Το επόμενο θεώρημα είναι θεμελιώδες και δίνει αναγκαία και ικανή συνθήκη για την ολική βελτιστοποίηση στο πρόβλημα (2.1), (2.2).

<u>Θεώρημα 2.1</u> (KUHN-TUCKER).

Μια ικανή και αναγκαία συνθήκη ώστε $x^{*} \in D$ είναι για κάθε βέλτιστη λύση των (2.1), (2.2) να υπάρχουν αριθμοί $\lambda_i \geq 0$ για $i=1,\ldots,m$ τέτοιοι ώστε:

$$Cx^{*}+d+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i a_i=0$$

$$\lambda_i[<a_i,x^{*}>-b_i]=0 \qquad \forall i \in I.$$

<u>Ορισμός 2.1</u>. Οι αριθμοί λ_i που αναφέρονται στο θεώρημα, ονομάζονται πολλαπλασιαστές Langrange.

2.3. Η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού.

Η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού προτάθηκε για πρώτη φορά από τον HESTENES με σκοπό την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων, ενώ η πρώτη εφαρμογή των προβλημάτων μη γραμμικής βελτιστοποίησης έγινε από τους FLETCHER και REEVES.

Το πρόβλημα συνίσταται στην ελαχιστοποίηση της

$$f(x)=1/2<x,Cx>+<x,d>,$$

σ' όλο το χώρο του R^n.

Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι η κατασκευή, προοδευτικά, διευθύνσεων $d_0, d_1, \ldots, d_k$ που είναι συζυγείς ανά δύο σε σχέση με τον πίνακα C της τετραγωνικής φόρμας.

Στην επανάληψη κ η διεύθυνση d_k λαμβάνεται ως γραμμικός συνδυασμός του διαφορικού - $\nabla f(x^k)$ της f στο x^k και των προηγούμενων διευθύνσεων $d_0, d_1, \ldots, d_{k-1}$. Οι συντελεστές του γραμμικού συνδυασμού επιλέγονται έτσι ώστε η d_k να είναι συζυγής προς όλες τις προηγούμενες $d_0, d_1, \ldots, d_{k-1}$.

Πιο συγκεκριμένα, ακολουθείται η εξής διαδικασία:

Εστω ότι είμαστε στην επανάληψη κ και στο σημείο x^k.

Τα γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα $d_0, d_1, \ldots, d_k$ που είναι (κ+1) σε πλήθος, περιγράφουν έναν υπο-χώρο D_k και ας σημειωθεί με $D_k = [d_0, d_1, \ldots, d_k]$ ο πίνακας με στήλες τα διανύσματα $d_0, d_1, \ldots, d_k$.

Το σημείο x^{k+1} της επόμενης επανάληψης λαμβάνεται ως το σημείο που πραγματοποιεί το ελάχιστο της $f(x)$ στην ευθεία $x^k + D_k$.

Αλλά η ελαχιστοποίηση της f στην $x^k + D_k$ είναι ισοδύναμη με το επόμενο πρόβλημα:

$$\min\{f(x^k+D_k w) \quad ; \quad w\in \mathbb{R}^{k+1}\}.$$

Εάν το $x^k + D_k$ τεθεί στην (2.1) τότε λαμβάνεται το επόμενο πρόβλημα:

$$\min\{1/2<w, D_k{}^t C D_k w>+<w, D_k g_k> \quad ; \quad w\in \mathbb{R}^{k+1}\}, \tag{2.3}$$

με $g_k=\nabla f(x^k)=Cx^k+d$

Το πρόβλημα (2.3.) δεχεται ως λύση το σημείο

$$w=-(D_k{}^t C D_k)^{-1} D_k{}^t g_k$$

Αρα το σημείο x^{k+1} δίνεται από την

$$x^{k+1}=x^k-D_k(D_k{}^t C D_k)^{-1} D_k{}^t g_k \quad . \tag{2.4}$$

Μ' αυτή την μέθοδο παρατηρείται ότι το g_{k+1} που είναι το διαφορικό της $f(.)$ στο σημείο x^{k+1} είναι ορθογώνιο ($x^t y = 0$) στα διανύσματα (d_i) $0\leq i\leq k$ (οι στήλες του D_k). Πράγματι:

$$\begin{aligned} D_k{}^t g_{k+1} &= D_k{}^t (Cx^{k+1}+d)= D_k{}^t (Cx^k+d-CD_k(D_k{}^t C D_k)^{-1} D_k{}^t g_k) \\ &= D_k{}^t g_k - D_k{}^t C D_k (D_k{}^t C D_k)^{-1} D_k{}^t g_k = D_k{}^t g_k - D_k{}^t g_k = 0 \end{aligned}$$

Στην συνέχεια, εάν κάθε σημείο x^j $j=1,\ldots, k$, λαμβάνεται ελαχιστοποιώντας την $f(.)$ στην διεύθυνση $x^{j-1}+D_{j-1}$, τότε με επαγωγικό τρόπο αποδεικνύεται ότι για $j=1,2,\ldots, k$

$$<g_j, d_i>=0 \qquad j>i \, . \tag{2.5}$$

Η σχέση (2.4.) γίνεται:

$$x^{k+1}=x^{k}+\delta_k D_k(D_k{}^{t}CD_k)^{-1}e_k. \qquad (2.6)$$

όπου e^k είναι η κ στήλη του μοναδιαίου πίνακα και $\delta_k=-<g_k,d_k>$.

Ας υποθέσουμε ότι τα (κ+1) διανύσματα είναι ανά δύο συζυγή σε σχέση με τον πίνακα C δηλαδή:

$$\left.\begin{array}{ll} \forall i \text{ τέτοιο ώστε} & 0\le i\le k \\ \forall j \text{ τέτοιο ώστε} & 0\le j\le k \\ i\ne j & \end{array}\right] \Rightarrow d_i^{t}.C.d_j=0 \qquad (2.7)$$

Εάν η (2.7) επαληθεύεται τότε η (2.6) γίνεται

$$x^{k+1}=x^{k}+\lambda^{k}d_k \qquad (2.8)$$

με $$\lambda^{k}=-\frac{<g_k,d_k>}{<d_k,Cd_k>}=\frac{\|g_k\|^2}{<d_k,Cd_k>}>0.$$

Η τιμή λ^k είναι το βήμα μετατόπισης. Επί πλέον η (2.8.) δείχνει ότι το (κ+1) διάνυσμα d_k είναι μια διεύθυνση μετατόπισης για την συνάρτηση f(.).

Από τον ορισμό της f(.) λαμβάνεται:

$$g_{l+1}-g_l=C(x^{l+1}-x^l)=\lambda^l Cd_l. \qquad (2.9)$$

Θέτοντας $y_l=g_{l+1}-g_l$ λαμβάνεται:

$$<y_l,d_j>=\lambda^l<Cd_l,d_j>=\lambda^l d_l^{t}.C.d_j=0 \qquad l\ne j. \qquad (2.9')$$

Τώρα, απομένει ο υπολογισμός των διευθύνσεων d_i, i=0,1,...,k. Θέτουμε

$$d_0=-g_0=-Cx^0-d;$$

Σε κάθε επανάληψη κ η διεύθυνση d_k λαμβάνεται ως γραμμικός συνδυασμός του g_k και των προηγούμενων διευθύνσεων $d_0, d_1,..., d_{k-1}$.

$$d_k=-g_k+\sum_{l=1}^{k-1}\beta_{k,l}d_l \tag{2.10}$$

Από την (2.10) φαίνεται εύκολα ότι το g_k είναι γραμμικός συνδυασμός των διανυσμάτων $d_0, d_1, ..., d_k$, άρα $g_i \in D_k$ για $1 \leq i \leq k$. Επειδή $d_0=-g_0$ άρα $g_0 \in D_k$.

$$\langle g_k, g_i \rangle = 0 \quad k>i. \tag{2.11}$$

Πολλαπλασιάζοντας την (2.10) με d_i^tC και με βάση τις (2.7.) και (2.9.) λαμβάνεται για $i=0,...,k-1$:

$$d_i^t C\, d_k = d_i^t C\, g_k + \sum_{l=0}^{k-1}\beta_{k,l} d_i^t C\, d_l = -\frac{1}{\lambda_i}(g_{i+1}-g_i)^t g_k + \beta_{k,i} d_i^t C\, d_i \tag{2.12}$$

Η σχέση (2.11) δείχνει ότι ο πρώτος όρος του δεύτερου μέρους της σχέσης (2.12) μηδενίζεται για (κ-1) πολύ μεγάλο. Ετσι και για να είναι το d_k συζυγές στο d_i για $\kappa-1>i$ πρέπει να επιλεγεί $\beta_{k,i}=0$ για $\kappa-1>i$.

Συνεπώς, ο $\beta_{k,k-1}$ είναι ο μόνος συντελεστής διαφορετικός του μηδενός και ο οποίος για ευκολία θα σημειώνεται με β_k. Για να προσδιοριστεί η τιμή του β_k έτσι ώστε η d_k να είναι συζυγής όταν d_{k-1}, πολλαπλασιάζεται η (2.10) με y_{k-1}^t και λαμβανοντας υπόψην ότι $\langle y_{k-1}, d_k \rangle=0$ λαμβάνουμε:

$$0=-\langle y_{k-1}, g_k\rangle+\beta_{k-1}\langle y_{k-1}, d_{k-1}\rangle,$$

απ' όπου

$$\beta_{k-1}=\frac{\langle y_{k-1}, g_k\rangle}{\langle y_{k-1}, d_{k-1}\rangle} \tag{2.13}$$

άρα η d_k γράφεται

$$d_k=-g_k+\beta_{k-1}d_{k-1}, \tag{2.14}$$

όπου το β_{k-1} δίδεται από την (2.13.)

Με βάση την (2.11) έχουμε:

$$\langle y_{k-1}, g_k\rangle=\langle g_k-g_{k-1}, g_k\rangle=\langle g_k, g_k\rangle-\langle g_k, g_{k-1}\rangle=\langle g_k, g_k\rangle,$$

και

$$<y_{k-1},d_{k-1}>=<g_k-g_{k-1},-g_{k-1}+\beta_{k-2}d_{k-2}>=<g_k,g_{k-1}>+<g_{k-1},g_{k-1}>+\beta_{k-2}y_{k-1}{}^{t}d_{k-2}$$

Με βάση την (2.9') $y_{k-1}{}^{t}d_{k-2}=0$ και με βάση την (2.11.) $<g_k,g_{k-1}>=0$,

απ' όπου

$$<y_{k-1},d_{k-1}>=<g_{k-1},g_{k-1}>=||g_{k-1}||^2$$

Επομένως ο β_{k-1} παίρνει την τιμή:

$$\beta_{k-1}=\frac{||g_k||^2}{||g_{k-1}||^2}=\frac{||\nabla f(x^k)||^2}{||\nabla f(x^{k-1})||^2}$$

Θέτοντας $g_k=\nabla f(x^k)$, η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού γίνεται:

α) Εστω x^0 το αρχικό σημείο και $d_0=-g_0=-\nabla f(x^0)=-Cx^0-d$

β) Στην επανάληψη κ, δηλαδή στο σημείο x^k προσδιορίζεται το x^{k+1} με

$$x^{k+1}=x^k+\lambda^k d_k$$

όπου

$$(1)\quad \lambda^k=-\frac{<g_k,d_k>}{<d_k,Cd_k>}=\frac{||g_k||^2}{<d_k,Cd_k>}$$

$$(2)\quad d_{k+1}=-g_{k+1}+\beta_k d_k$$

$$(3)\quad \beta_k=\frac{<g_{k+1},C.d_k>}{<d_k,C.d_k>}$$

Αντικαθιστούμε κ←κ+1 και επιστρέφουμε στο (β).

<u>Θεώρημα 2.2</u> (N.GASTINEL [9])

Η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού που περιγράφηκε πιο πάνω συγκλίνει σε n επαναλήψεις το πολύ.

Η ιδέα της απόδειξης είναι η επόμενη: Τα διαδοχικά g_j οδηγούνται σε ορθογωνοποίηση, δηλαδή πρέπει να βρεθεί ένα g_k ίσο με 0.

2.4. Τελεστής προβολής.

Εστω $I = \{ i : 1 \leq i \leq m \}$ και J υποσύνολο του I. Σχηματίζεται πίνακας A_j με γραμμές τα διανύσματα a_i , $i \in J$ με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι πίνακας $p \times n$ όπου p το πλήθος των στοιχείων του J.

Λήμμα 2.1. Τα διανύσματα a_i ,$i \in J$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητα τότε και μόνο τότε αν ο πίνακας $A_j A_j^t$ είναι κανονικός.

Απόδειξη:

Θέτουμε $\quad P = A_J^t (A_J A_J^t)^{-1} A_J.$

Εύκολα δείχνεται ότι

1) $P.P = P$

2) $P^t = P$

3) $P(I-P) = (I-P)P = 0.$

Ο τελεστής P είναι ένας τελεστής ορθής προβολής σε υποχώρο που παράγεται από τα διανύσματα a_i ,$i \in J$.

2.5. Ελαχιστοποίηση τετραγωνικής συνάρτησης πάνω σε πολλαπλότητα AFFINE.

Εστω ότι πρέπει να ελαχιστοποιηθεί η συνάρτηση

$$f(x) = 1/2 <x, Cx> + <x, d>, \qquad (2.5.1)$$

με περιορισμούς

$$<a_i, x> - b_i = 0 \qquad i \in J , \qquad (2.5.2)$$

όπου J ένα υποσύνολο του $\{1,2,\dots,m\}$. Τα διανύσματα $a_i, i \in J$ θεωρούνται γραμμικώς ανεξάρτητα.

Μ' αυτές τις προϋποθέσεις, ο πίνακας $A_J A_J^t$ είναι κανονικός και ορίζεται η ορθή προβολή στον υποχώρο που παράγεται από τα διανύσματα $a_i, i \in J$ με τον τελεστή.

$$P = A_{;J}^t (A_{;J} A_{;J}^t)^{-1} A_{;J}.$$

Εστω x^0 σημείο που ικανοποιεί την (2.5.2). Εισάγεται νέα μεταβλητή y με τον τύπο :

$$x = x^0 + (I-P)y\,, \tag{2.5.3}$$

και θεωρούμε την τετραγωνική συνάρτηση

$$\varphi(y) = f(x^0 + (I-P)y).$$

με

$$\nabla\varphi(y) = (I-P)\nabla f(x)\,. \tag{2.5.4}$$

Βρίσκουμε εύκολα ότι το πρόβλημα (2.5.1.), (2.5.2.) ανάγεται στην ελαχιστοποίηση της συνάρτησης $\varphi(y)$ χωρίς περιορισμούς. Η αναζήτηση του ελαχίστου της $\varphi(y)$θα γίνει με την μέθοδο του συζυγούς διαφορικού.

2.6. Περιγραφή του αλγορίθμου για την επίλυση του προβλήματος (2.1), (2.2).

Θεωρούμε πάλι το πρόβλημα (2.1), (2.2) που συνίσταται στην ελαχιστοποίηση της

$$f(x) = 1/2\langle x, Cx\rangle + \langle x, d\rangle \tag{2.6.1}$$

με τους περιορισμούς

$Ax \leq b$. (2.6.2)

Τίθεται $J(x)=\{i\ ;\ 1\leq i\leq m$ έτσι ώστε $\langle a_i, x\rangle - b_i=0\}$, και θεωρείται ότι για κάθε X τα διανύσματα a_i είναι γραμμικώς ανεξάρτητα.

Εστω x^0 ένα οποιοδήποτε σημείο που ικανοποιεί την (2.6.1) και πραγματοποιεί την αρχική προσέγγιση. Θεωρούμε ένα σύνολο δεικτών $J_0=J(x^0)$ και κατασκευάζεται :

$$P_{J0}=A_{J0}'(A_{J0}A_{J0}')^{-1}A_{J0}$$

Υπολογίζονται οι ποσότητες :

$$v_0=-(A_{J0}A_{J0}')^{-1}A_{J0}\nabla f(x^0),\ \text{et}\ (I-P_{J0})\nabla f(x^0)=\nabla f(x^0)+A_{J0}'v_0.$$

Υπάρχουν, ενδεχομένως, δύο περιπτώσεις:

1) $(I-P_{J0})\nabla f(x^0)=0$

οπότε

$$\nabla f(x^0)+A_{J0}'v_0=0.$$

και x^0 πραγματοποιεί το ελάχιστο της $f(x)$ στη φάση που ορίζεται από το σύστημα εξισώσεων

$$(a_i, x)-b_i=0 \qquad i\in J_0.$$

Αν το διάνυσμα v_0 δεν έχει συνιστώσες αρνητικές, το σημείο x^0 είναι λύση του αρχικού προβλήματος διότι οι (2.6.2) είναι οι αναγκαίες συνθήκες και ικανές για την ύπαρξη ελαχίστου της $f(x)$ με τους περιορισμούς $Ax\leq 0$

Εστω τώρα ότι υπάρχει δείκτης $j\in J_0$ ίσος με $v_0^j<0$

Κατασκευάζεται νέο σύνολο δεικτών J_0 απαλείφοντας από το J_0 τον δείκτη j και επιλύεται το πρόβλημα:

(2.6.3)

$$\min f(x),$$

με

$$<a_i, x> - b_i = 0 \quad i \in J_0'$$

(2.6.4)

με τη μέθοδο της συζυγούς gradient.

Το σημείο που υπολογίζεται, δεν πρέπει να βρίσκεται έξω από το πεδίο στο οποίο ορίζεται $Ax \leq B$ Για να αποφευχθεί αυτό το φαινόμενο εκτελείται σε κάθε βήμα μία επαλήθευση, υπολογίζοντας

$$\lambda_k^* = \min\left(\frac{b_i - <a_i, x^k>}{<a_i, d_k>} \; ; \; i \in J \right) \qquad J = \{i \; ; \; <a_i, d_k> > 0\}.$$

Εδώ x^k είναι ένα σημείο της ακολουθίας που δημιουργείται από τον αλγόριθμο και d_k η διεύθυνση η συζυγής προς αυτό το σημείο. Εστω τώρα λ^k το μέγεθος στο αντίστοιχο βήμα της μεθόδου συζυγούς βαθμίδος (gradient).

Ετσι αν $\lambda^k < \lambda_k^*$ τότε $x^{k+1} = x^k + \lambda^k d_k$ και η διαδικασία συνεχίζεται

αν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$ τότε $x^{k+1} = x^k + \lambda_k^* d_k$ και η διαδικασία τελειώνει.

<u>Συμπέρασμα:</u> Είτε πραγματοποιείται το minimum της f(x) με τους περιορισμούς (2.6.2), είτε η διαδικασία τερματίζεται όταν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$.

Και στις δύο περιπτώσεις ξαναρχίζουμε με το σημείο που υπολογίστηκε σα να πρόκειται για το αρχικό σημείο v_0.

2) $(I - P_{J0}) \nabla f(x^0) \neq 0$.

Σ' αυτή την περίπτωση, επιλύεται με την τεχνική συζυγούς διαφορικού το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της f(x) με τους περιορισμούς:

$$(a_i, x) \; b_i = 0 \qquad i \in J_0, \qquad (2.6.5)$$

με σημείο αφετηρίας x0 . Οπως στην πρώτη περίπτωση, δοκιμάζεται σε κάθε βήμα το παραδεκτό των σημείων που έχουν βρεθεί, δηλαδή υπολογίζεται

$$\lambda_k^* = \min\left\{ \frac{b_i - \langle a_i, x^k \rangle}{\langle a_i, d_k \rangle} \ ; \ i \in J \right\} \qquad J = \{ i \ ; \ \langle a_i, d_k \rangle > 0 \}.$$

Ομοια, σε κάθε περίπτωση :

Αν $\lambda^k < \lambda_k^*$; οπότε $x^{k+1} = x^k + \lambda^k d_k$ και η διαδικασία συνεχίζεται

Αν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$ οπότε $x^{k+1} = x^k + \lambda_k^* d_k$ και η διαδικασία σταματά.

Συμπέρασμα : Είτε πραγματοποιείται το ελάχιστο της f(x) υπό τις συνθήκες (2.6.5), είτε η διαδικασία σταματά αν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$.

2.7. Ανάπτυξη του αλγορίθμου.

Εστω x0 σημείο οποιοδήποτε με $Ax^0 \leq b$, $J_0 = \{ 1 \leq i \leq m \ ; \ \langle a_i, x \rangle - b_i = 0 \}$

και A_{J0} ο πίνακας με στήλες τα διανύσματα a_i, $i \in J_0$.

Θέτουμε $P_{J0} = A_{J0}^t (A_{J0} A_{J0}^t)^{-1} A_{J0}$ και $v_0 = -(A_{J0} A_{J0}^t)^{-1} A_{J0} \nabla f(x^0)$

1) Αν $(I - P_{J0}) \nabla f(x^0) = 0$ τότε πηγαίνουμε στο (2)

Αν $(I - P_{J0}) \nabla f(x^0) \neq 0$ τότε πηγαίνουμε στο (3)

2) Αν $v_0^i \geq 0$, $i \in J_0$ τότε x0 είναι η λύση του προβλήματος (2.1.), (2.2.).

Αν όχι, δηλαδή αν υπάρχει iωJ0 με $v_0^i < 0$, τότε τίθεται $J_0 = J_0 - \{j\}$ και πηγαίνουμε στο (3).

3) Διαδικασία της συζυγούς gradient για την ελαχιστοποίηση της

$$f(x) = 1/2 \langle x, Cx \rangle + \langle x, d \rangle \quad (^{**})$$

με περιορισμούς

$$\langle a_i, x \rangle - b_i = 0 \ \ i \in J_0 .$$

A) Θεωρείται x0 σαν σημείο αρχικό και τίθεται $d_0 = -(I - P_{J0}) \nabla f(x^0)$

B) Σαν βήμα κ έχουμε x^k. Για να υπολογισθεί το x^{k+1} ακολουθείται ο εξής τρόπος:

Ορίζεται

$$d_k = -(I - P_{J0})\nabla f(x^k) + \beta^k d_{k-1},$$

όπου

$$\beta^k = \frac{\|(I-P)\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|(I-P)\nabla f(x^k)\|^2}$$

$$\lambda^k = \frac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{<d_k, Cd_k>} \quad k=0,1,2,\ldots$$

και

$$\lambda_k^* = \min\{\frac{b_i - <a_i, x^k>}{<a_i, d_k>} \; ; \; i \in J\} \qquad J = \{i \; ; \; <a_i, d_k> > 0\}.$$

Αν $\lambda^k < \lambda_k^*$ τότε $x^{k+1} = x^k + \lambda^k d_k$, αντικαθίσταται το $k \leftarrow k+1$ και ξαναρχόμαστε στο (B) ώσπου να βρεθεί σημείο που να πραγματοποιεί το ελάχιστο του προβλήματος (*,*). Σημειώνεται με x^* και πηγαίνουμε στο (4).

Αν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$ τότε $x^{k+1} = x^k + \lambda_k^* d_k$; Θέτουμε $x^* = x^{k+1}$ και πηγαίνουμε στο (4).

4) Θέτουμε $x^0 = x^*$ και $J_0 = \{1 \leq i \leq m \; , <a_i, x^*> - b_i < 0\}$ και ξαναρχίζει η διαδικασία (πέρασμα στο (1)).

2.8. Δυαδικότητα και συνάρτηση Lagrange.

Εστω το πρόβλημα

$$\min f(x), \tag{2.8.1}$$

με τους περιορισμούς

$$g_i(x)\leq 0 \qquad 1\leq i\leq m. \tag{2.8.2}$$

Η συνάρτηση Lagrange του προβλήματος (2.8.1), (2.8.2) ορίζεται με

$$L(x,u)=\begin{cases} f(x) + \langle u, g(x)\rangle & u\geq 0 \\ -\infty & \text{αλλού}\end{cases}$$

όπου $u=(u_1,u_2,\ldots,u_m)'$ και $g(x)=(g_1(x),g_2(x),\ldots,g_m(x))'$.

Το διάνυσμα $u=(u_1,u_2,\ldots,u_m)'$ είναι το διάνυσμα της δυαδικής μεταβλητής. Αυτή η συνάρτηση παίζει θεμελιώδη ρόλο στην θεωρία του Δυϊσμού.

Ορίζεται ως αρχική συνθήκη η

$$L_p(x)=Sup\{L(x,u) \;;\; u\geq 0\},$$

και ως δυαδική η

$$L_d(u)=Inf\{L(x,u) \;;\; x\in \mathbb{R}^n\}.$$

Η αρχική συνθήκη είναι f(x). Οπως η αρχική συνάρτηση είναι συνάρτηση του x (ή δυαδική του U), ετσι μπορούν να τυποποιηθούν και τα επόμενα προβλήματα βελτιστοποίησης.

Πρόβλημα αρχικό

$$min\{L_p(x) \;;\; g_i(x)\leq 0 \;;\; 1\leq i\leq m\}=min\{f(x) \;;\; g_i(x)\leq 0 \;;\; 1\leq i\leq m\}. \tag{2.8.3}$$

Πρόβλημα δυϊκό

$$max\{L_d(x) \;;\; u\geq 0\}. \tag{2.8.4}$$

Ορίζεται έτσι ένα σημείο μόνο της συνάρτησης Lagrange (x^*,u^*), $u^*\geq 0$

με

$$L(x^*,u)\leq L(x^*,u^*)\leq L(x,u^*) \qquad \forall u\geq 0 \qquad \forall x\in \mathbb{R}^n . \tag{2.8.5}$$

Σημειώνεται με D το σύνολο των λύσεων που πραγματοποιούν τις (2.8.1.), (2.8.2.) δηλαδή

$$D=\{x\in \mathbb{R}^n \ ; \ g_i(x)\leq 0 \ , \ 1\leq i\leq m\}. \tag{2.8.6}$$

Για να επαληθεύει το πεδίο D που ορίζεται από τους περιορισμούς

$$g_i(x)\leq 0 \quad (1\leq i\leq m)$$

την $x^0\in D$ η υπόθεση της ποιοτικής των περιορισμών του Slater (1950), αρκεί να πραγματοποιείται η συνθήκη:

"Όλες οι συναρτήσεις g_i να είναι κυρτές και το D να έχει εσωτερικό μη κενό."

Υπάρχει το θεώρημα του KUHN και TUCKER (1951) που δίνει αναγκαία και ικανή συνθήκη ώστε το σημείο να είναι ένα ελάχιστο του προβλήματος μη γραμμικού προγραμματισμού.

<u>Θεώρημα[15]:</u> Υποθέτουμε ότι οι συναρτήσεις f και g_i είναι συνεχώς διαφορίσιμες και ότι η υπόθεση "ποιοτικοποίησης" των περιορισμών επαληθεύεται αν $x^0\in D$ όπου D ορίζεται με τις (2.8.6). Τότε το σημείο x^* είναι λύση του αρχικού προβλήματος τότε και μόνο όταν υπάρχει $u^*\geq 0$ ώστε (x^*,u^*) να είναι ένα μοναδικό σημείο της συνάρτησης Lagrange. Σ' αυτή την περίπτωση u^* είναι η λύση του δυϊκού προβλήματος. Με άλλα λόγια (x^*,u^*) είναι σημείο μοναδικό της L ορισμένης από την (2.8.5) τότε και μόνο όταν:

$$\nabla_x L(x^*,u^*)=0$$
$$\nabla_u L(x^*,u^*)\leq 0$$
$$<u,\nabla_u L(x^*,u^*)>=0$$
$$u^*\geq 0$$

όπου ∇x, ∇u οι gradient αντίστοιχα ως προς x και u.

Η θεωρία της δυϊκότητας επιτρέπει να σχηματισθούν και να επιλυθούν πιο εύκολα, προβλήματα του δυικού χώρου στη θέση του αρχικού προβλήματος.

2.8.1. Το δυϊκό του τετραγωνικού προβλήματος.

Θεωρείται ξανά το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της τετραγωνικής συνάρτησης

$$f(x)=1/2\langle x,Cx\rangle+\langle x,d\rangle,$$

με περιορισμούς

$$Ax\leq b.$$

Σύμφωνα με την προηγούμενη μελέτη το δυϊκό του προβλήματος είναι:

$$\max\{\min\{1/2\langle x,Cx\rangle+\langle x,d\rangle+\langle u,Ax-b\rangle \ ; \ x\in \mathbb{R}^n\} \ ; \ u\geq 0\}. \qquad (2.8.11)$$

Το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς είναι :

$$\min\{1/2\langle x,Cx\rangle+\langle x,d\rangle+\langle u,Ax-b\rangle \ ; \ x\in \mathbb{R}^n\},$$

και έχει λύση

$$x^*=-C^{-1}[d+A^t u]. \qquad (2.8.12)$$

Από τις (2.8.11) και (2.8.12) έχουμε

$$\min\{1/2\langle u,AC^{-1}A^t u\rangle+\langle u,b+AC^{-1}d\rangle \ ; \ u\geq 0\}. \qquad (2.8.13)$$

Αυτό το δυϊκό πρόβλημα είναι επίσης ένα τετραγωνικό πρόγραμμα αλλά το πλήθος των μεταβλητών είναι m αντί n, γεγονός που το καθιστά πιο εύκολο στην επίλυση. Παρατηρείται εξάλλου ότι το δυϊκό πρόβλημα έχει περιορισμούς απλούστερους (της θετικότητας).

2.9. Μέθοδος λύσης του δυϊκού προβλήματος.

Το δυϊκό πρόβλημα συνίσταται στο να ελαχιστοποιηθεί η

$$F(u)=1/2<u,AC^{-1}A^tu>+<u,b+AC^{-1}d> \quad ; \quad u\geq 0), \tag{2.9.1}$$

με τους περιορισμούς

$$u_i\geq 0 \qquad i=1,\dots\dots,m \tag{2.9.2}$$

με

$$u=(u_1,u_2,\dots,u_m)^t\in \mathbb{R}^n.$$

<u>Θεώρημα [23]</u> : Για να πραγματοποιείται στο σημείο u^* το ελάχιστο της συνάρτησης F(.)στο σύνολο $u_i\geq 0$, $i=1,\dots,m$, πρέπει και αρκεί να ισχύουν οι σχέσεις:

$$\frac{\partial F(u^*)}{\partial u_j}\geq 0 \qquad u_j=0 \qquad j=1,2,\dots\dots,m.$$

$$\frac{\partial F(u^*)}{\partial u_j}=0 \qquad u_j\neq 0 \qquad j=1,2,\dots\dots,m.$$

Για να λύσουμε τις (2.9.1) και (2.9.2), ακολουθείται ο επόμενος αλγόριθμος:

Εστω u^0 αυθαίρετο σημείο με $u_i^0\geq 0$ για $i=1,\dots,m$;

Θέτουμε

$$J(u)=\{1\leq i\leq m \ ; \ u_i=0\}.$$

Περιγράφονται οι πράξεις από το u^0 και υπολογίζεται το σύνολο $J(u^0)$ Υπάρχουν δύο δυνατές περιπτώσεις:

1) $[\nabla F(u^0)]^i=0$, $i\notin J(u^0)$ όπου $[\nabla F(u^0)]^i$ είναι η i-οστή συνιστώσα του διανύσματος $\nabla F(u^0)$. Σ' αυτή την περίπτωση το u^0 πραγματοποιεί το ελάχιστο της F(u) με τους περιορισμούς .Αν επιπλέον $[\nabla F(u^0)]^i>0$, $i\in J(u^0)$ τότε u^0 είναι λύση του προβλήματος, διότι σ' αυτό το σημείο οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες του ελαχίστου πραγματοποιούνται.

Εστω τώρα $[\nabla F(u^0)]^i<0$ για μερικά $i\in \mathcal{J}(u^0)$.

Θέτουμε

$$\mathcal{J}'=\{i\in \mathcal{J}(u^0)\ :\ [\nabla F(u^0)]^i\geq 0\ \}.$$

Επιλύεται το πρόβλημα

$$\min F(u),$$

με τις προϋποθέσεις $u_i=0$ $i\in \mathcal{J}'$.

Με την μέθοδο συζυγούς gradient πρέπει πάντα να υπολογίζονται :

$$\lambda_k^*=\min\{-\frac{u_i^k}{d_k^i}\ ;\ i\in J\} \qquad J=\{i\notin \mathcal{J}'\ :\ d_k^i<0\}.$$

και συγκρίνονται το λ^K με λ_K^*

Αν $\lambda^k<\lambda_k^*$ τότε $u_i^{k+1}=u_i^k+\lambda^k d_k^i$, $i\notin \mathcal{J}'$ $u_i^{k+1}=u_i^k=0$, $i\in \mathcal{J}'$.

Αν $\lambda^k\geq\lambda_k^*$ τότε $u_i^{k+1}=u_i^k+\lambda_k^* d_k^i$, $i\notin \mathcal{J}'$ $u_i^{k+1}=u_i^k=0$, $i\in \mathcal{J}'$.

Η διαδικασία σταματάει μετά από πεπερασμένα βήματα και βρίσκεται σημείο u^{k+1} τέτοιο ώστε $\lambda^K\geq\lambda_K^*$

Η F(u) παίρνει το ελάχιστο με u^{k+1} στην αναχώρηση. Σε κάθε μία περίπτωση η διαδικασία ξαναρχίζει.

2)Υπάρχουν δείκτες τέτοιοι ώστε$[\nabla F(u^0)]^i\neq 0$, $i\notin \mathcal{J}(u^0)-\mathcal{J}_0$ ελαχιστοποιείται λοιπόν η F(u), με προϋποθέσεις $u_i=0$ $i\in \mathcal{J}_0$, με τη μέθοδο της συζυγούς gradient. Επί πλέον υπολογίζεται σε κάθε βήμα (όπως στο βήμα (1)) η ποσότητα

$$\lambda_k^*=\min\{-\frac{u_i^k}{d_k^i}\ ;\ i\in J\} \qquad \text{για} \quad J=\{i\notin \mathcal{J}_0\ :\ d_k^i\}$$

και συγκρίνεται το λ^K με λ_K^*

Αν $\lambda^k<\lambda_k$ τότε $u_i^{k+1}=u_i^k+\lambda^k d_k^i$, $i\notin \mathcal{J}_0$ $u_i^{k+1}=u_i^k=0$, $i\in \mathcal{J}_0$

Αν $\lambda^k\geq\lambda_k^*$ τότε $u_i^{k+1}=u_i^k+\lambda_k^* d_k^i$, $i\notin \mathcal{J}_0$ $u_i^{k+1}=u_i^k=0$, $i\in \mathcal{J}_0$

Η διαδικασία σταματά όπως και στην περίπτωση (1).

2.10. Ανάπτυξη του αλγορίθμου για το δυϊκό πρόβλημα.

Εστω u^0 σημείο τέτοιο ώστε $u_i^0 \geq 0$ για $1 \leq i \leq m$ και $J_0 = \{1 \leq i \leq m \; ; \; u_i^0 = 0\}$.

1) Αν $[\nabla f(u^0)]^i = 0$, $i \notin J_0$ περνάμε στη (2).

Αν $[\nabla f(u^0)]^i \neq 0$ για καθορισμένο $i \notin J_0$ πηγαίνουμε στο (3).

2) Εστω ότι για κάθε i ισχύει $[\nabla f(u^0)]^i \geq 0$, $i \in J_0$ τότε u^0 είναι λύση του προβλήματος (2.9.1), (2.9.2). Αν δηλαδή υπάρχει $j \in J_0$ τέτοιο ώστε $[\nabla f(u^0)]^j < 0$

Θέτουμε λοιπόν $J_0 = J_0 - \{i \in J_0 : [\nabla f(u^0)]^i < 0\}$ και περνάμε στο (3).

3) Διαδικασία της συζυγούς gradient για την ελαχιστοποίηση της

$$f(u) = 1/2 < u, AC^{-1}A^t > + < u, AC^{-1}d > \quad (**),$$

με περιορισμούς

$$u_i = 0 \; ; \; i \in J_0 .$$

α) Παίρνουμε σαν αφετηρία u^0 και θέτουμε $d_0 = -\nabla F(u^0)$.

β) Στο βήμα κ έχουμε u^k . Για να προσδιοριστεί το u^{k+1}, δουλεύουμε ως εξής:

Ορίζουμε

$$d_k = -\nabla F(u^k) + \beta_{k-1} d_{k-1},$$

με

$$\beta_{k-1} = \frac{\|\nabla F(u^k)\|^2}{\|\nabla F(u^{k-1})\|^2}$$

Ορίζουμε το βήμα μετατόπισης με

$$\lambda^k = \frac{\langle \nabla F(u^k), d_k \rangle}{\langle d_k , AC^{-1}A^T d_k \rangle}$$

και

$$\lambda_k^* = \min\{ -\frac{u_i^k}{d_k^i} \; ; \; i \in J\}$$

$$J = \{i \notin J_0 \; : \; d_k < 0\}$$

Αν $\lambda^k < \lambda_k^*$ τότε $u_i^{k+1} = u_i^k + \lambda^k d_k^i$, $i \notin J_0$ και $u_i^{k+1} = u_i^k = 0$, $i \in J_0$

Αντικαθίσταται το κ→ κ+1 και επιστρέφουμε στο (β) ώσπου να υπολογιστεί το σημείο u^* που πραγματοποιεί το ελάχιστο του προβλήματος (*,*) και πηγαίνουμε στο (4).

Αν $\lambda^k \geq \lambda_k^*$ τότε $u_i^{k+1} = u_i^k + \lambda_k^* d_k^i$, $i \notin J_0$ και $u_i^{k+1} = u_i^k = 0$, $i \in J_0$

Θέτουμε $u^* = u^{k+1}$ και πηγαίνουμε στο (4).

4) Θέτουμε $u^0 = u^*$ και $J_0 = \{1 \leq i \leq m \ ; \ u^* = 0\}$, και κατόπιν ξαναρχίζουμε τη διαδικασία.

2.11. Εφαρμογές.

2.11.1. Πρόβλημα ισοτονικής παλινδρόμησης.

Το πρόβλημα συνίσταται στην ελαχιστοποίηση της

$$\sum_{i=1}^{n} w_i (g_i - x_i)^2 , \qquad (2.11.1.)$$

με τους περιορισμούς $x_i - x_{i-1} \leq 0$ για $i=2,\ldots,n$ (2.11.2.)

με

$$w_i > 0 \ , \ 1 \leq i \leq n \ , \ g = (g_1, g_2, \ldots, g_n)' \in \mathbb{R}^n, \ x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)' \in \mathbb{R}^n.$$

Θέτουμε

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_n \end{bmatrix} \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας W είναι n x n διαγώνιος συμμετρικός, θετικά ορισμένος και με διαγώνια στοιχεία W_i ($1 \leq i \leq n$) μη αρνητικά, ενώ ο πίνακας A είναι (n-1) x n πίνακας , παριστάνει τους περιορισμούς του οποίου η i γραμμή αποτελείται από μηδενικά εκτός της i τάξεως που έχουν τιμές 1 και -1. Ετσι το πρόβλημα (2.11.1), (2.11.2) ισοδυναμεί με

$$\min 1/2 \langle x, Wx \rangle + \langle x, -Wg \rangle \qquad (2.11.3.)$$

με περιορισμούς $\quad Ax \leq 0. \qquad$ (2.11.4)

Παρατηρείται εύκολα ότι το πρόβλημα της ισοτονικής παλινδρόμησης ανάγεται σε πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού με περιορισμούς γραμμικότητας. Σημειώνεται επίσης ότι οι γραμμές του A είναι γραμμικώς ανεξάρτητες.

Αν θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα (2.11.3), (2.11.4) με τη μέθοδο της συζυγούς gradient με συνθήκες που αναφέρονται στην παράγραφο (2.6).

Το δυϊκό πρόβλημα της ισοτονικής παλινδρόμησης περιγράφεται ως εξής:

$$\min 1/2 \langle u, AW^{-1}A^t u \rangle + \langle u, -AW^{-1} g \rangle \qquad (2.11.5)$$

με περιορισμούς $u_i \geq 0$ με $i=1,\dots,n-2.$ (2.11.6.)

Ο πίνακας που ορίζει τον τετραγωνικό όρο δίνεται από

$$AW^{-1}A^t = \begin{bmatrix} \frac{1}{w_1}+\frac{1}{w_2} & -\frac{1}{w_2} & \dots\dots\dots & & & 0 \\ -\frac{1}{w_2} & \frac{1}{w_2}+\frac{1}{w_3} & -\frac{1}{w_3} & \dots\dots\dots & & 0 \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots\dots\dots & & -\frac{1}{w_{n-1}} \\ 0 & 0 & 0 & & -\frac{1}{w_{n-1}} & \frac{1}{w_{n-1}}+\frac{1}{w_n} \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας που ορίζει τον τετραγωνικό όρο στο δυϊκό πρόβλημα είναι απλούστερος αφού είναι τρι-διαγώνιος.

Η γενική μορφή των γραμμών του $AW^{-1}A^t$ είναι

$$(AW^{-1}A^t)_1 = \left(\frac{1}{w_1}+\frac{1}{w_2}, -\frac{1}{w_2}, 0, 0, \dots\dots\dots 0\right)$$

$$(AW^{-1}A^t)_i = \left(0, 0, \dots\dots, -\frac{1}{w_i}, \frac{1}{w_i}+\frac{1}{w_{i+1}}, -\frac{1}{w_{i+1}}, 0, 0 \dots\dots 0\right) \qquad i=2,\dots\dots,n-2$$

$$(AW^{-1}A^t)_{i(i-1)} = -\frac{1}{w_i}$$

$$(AW^{-1}A')_{i(i)} = \frac{1}{w_i} + \frac{1}{w_{i+1}}$$

$$(AW^{-1}A')_{i(i+1)} = -\frac{1}{w_{i+1}}$$

$$(AW^{-1}A')_{i(j)} = 0 \qquad j \neq i-1, i, i+1.$$

$$(AW^{-1}A')_{n-1} = (0, 0, \ldots\ldots, 0, -\frac{1}{w_{n-1}}, \frac{1}{w_{n-1}} + \frac{1}{w_n}).$$

Αφού προσδιοριστεί το u^* ορίζεται αμέσως η λύση του προβλήματος της ισοτονικής παλινδρόμησης

$$x^* = -W^{-1}A'u^* + W^{-1}g.$$

Μετά τις πράξεις, το διάνυσμα x^* είναι:

$$x^{*\prime} = (\frac{g_1 - u_1^*}{w_1}, \frac{u_1^*}{w_2} + \frac{g_2 - u_2^*}{w_2}, \ldots\ldots\ldots\ldots, \frac{u_{n-2}^*}{w_{n-1}} + \frac{g_{n-1} - u_{n-1}^*}{w_{n-1}}, \frac{g_n + u_n^*}{w_n})$$

Για τη λύση του προβλήματος της ισοτονικής παλινδρόμησης είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί στο δυϊκό πρόβλημα.

2.11.2. Κοίλη παλινδρόμηση.

Το πρόβλημα είναι:

$$\min \sum_{i=1}^{n} w_i (g_i - x_i)^2 . \qquad (2.11.7.)$$

υπό τους περιορισμούς

$$\frac{x_i - x_{i-1}}{y_i - y_{i-1}} \leq \frac{x_{i+1} - x_i}{y_{i+1} - y_i} \qquad (2.11.8.)$$

για $i=2,\ldots,n-1$

με

$$w_i>0\ ,\ 1\leq i\leq n\ ,\ g=(g_1,g_2,\ldots,g_n)'\in \mathbb{R}^n,\ x=(x_1,x_2,\ldots,x_n)'\in \mathbb{R}^n.$$

Οι μεταβλητές y_i επαληθεύουν τις σχέσεις: $0<y_1<y_2<\ldots\ldots\ldots<y_n$

$$A=\begin{bmatrix} y_3-y_2 & -(y_3-y_1) & y_2-y_1 & 0 & \cdots & & & 0 \\ 0 & y_4-y_3 & -(y_4-y_2) & y_3-y_2 & 0 & \cdots & & 0 \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & & & & & & & \\ \cdot & & & & & & & \\ \cdot & & & & & & & \\ \cdot & & & & 0 & y_n-y_{n-1} & -(y_n-y_{n-2}) & y_{n-1}-y_{n-2} \end{bmatrix}$$

Οπως στην περίπτωση (2.11.1), ισχύει ισοδυναμία μεταξύ προβλημάτων κοίλης παλινδρόμησης και τετραγωνικού προγραμματισμού. Ετσι το πρόβλημα γίνεται :

$$\min 1/2 \langle x,Wx\rangle + \langle x,-Wg\rangle$$

με περιορισμούς $Ax\leq 0$

Ο πίνακας A δίνεται με την παραπάνω έκφραση.

Μοντελοποίηση της μεθόδου του συζυγούς διαφορικού στο δυικό πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού για την εφαρμογή της ισοτονικής παλινδρόμησης.

Α) Εισαγωγή των διανυσμάτων G , W.

Β) Παρατηρείται ότι στην συνάρτηση f(u) που πρέπει να ελαχιστοποιηθεί περιέχεται ο πίνακας $P= A^{*}W^{-1} A^{T}$. Κάνοντας τους πολλαπλασιασμούς αυτών των πινάκων υπολογίζεται ένας νέος πίνακας που περιγράφεται στην παρ. (2.11.1).

Ξεκινάμε λοιπόν από τα στοιχεία της πρώτης και τελευταίας γραμμής. Ετσι:

P(1,1)= (1/W(1))+(1/W(2))

P(1,2) = -1/W(2)

P(N-1,N-2)=-1/W(N-1)

P(N-1,N-1)=(1/W(N-1))+1/W(N)

Τα υπόλοιπα στοιχεία της πρώτης και της τελευταίας γραμμής τα μηδενίζουμε. Για τον καθορισμό των υπολοίπων στοιχείων παρατηρείται ότι το κάθε στοιχείο πριν το στοιχείο της διαγωνίου, ισούται με -1/W(I) , το στοιχείο της διαγωνίου ισούται με (1/W(I)) +1/W(I+1) και το επόμενο στοιχείο της διαγωνίου ισούται με -1/W(I+1). Επομένως για τον καθορισμό αυτών των γραμμών του πίνακα βρίσκεται το αμέσως προηγούμενο στοιχείο από το στοιχείο της διαγωνίου και δίνεται σ' αυτό καθώς και στα δύο επόμενα τις τιμές που προαναφέραμε. Τα υπόλοιπα στοιχεία κάθε γραμμής μηδενίζονται.

Γ) Στη συνέχεια καθορίζεται η αρχική τιμή του U που θα πρέπει να είναι $U^{0}(I) \geq 0$. Ετσι αυθαίρετα παίρνουμε την τιμή $U^{0}(I)=[1,1,1,\ldots,1]$.

Δ) Κατόπιν καθορίζεται το σύνολο J το οποίο αποτελείται από τους δείκτες των συνιστωσών του U που είναι ίσοι με μηδέν. Επειδή όμως οι αριθμοί είναι πραγματικοί και επειδή στις πράξεις θα υπάρχει κάποιο σφάλμα, ο έλεγχος των U(i) γίνεται με το κατά πόσο αυτές οι τιμές προσεγγίζουν το μηδέν. Πιο συγκεκριμένα, στην περίπτωσή μας, αν $|U(I)| \leq 10^{-7}$.

Δημιουργείται πίνακας K1 που οι συνιστώσες του έχουν την τιμή μηδέν ή την τιμή του δείκτη εκείνου του U(I) που προσεγγίζει το μηδέν.

Ε) Σ' αυτό το στάδιο υπολογίζεται το ανάδελτα διάνυσμα της συναρτήσεως F. Είναι γνωστό ότι η συνάρτηση F έχει τη μορφή:

$F(U)=1/2\langle U, AW^{-1}A^T\rangle + \langle U, AW^{-1}\rangle$

Επειδή οι πίνακες A και W όπως έχει ήδη προαναφερθεί έχουν πολύ απλή μορφή, θεωρήθηκε προτιμότερο να γίνουν οι πράξεις της F(u) με τις γνωστές τιμές των πινάκων και να δοθεί μία τελική μορφή στο ανάδελτα διάνυσμα η οποία και θα προγραμματιστεί. Χωρίζεται λοιπόν η συνάρτηση σε δύο επιμέρους συναρτήσεις: στην $F1 = 1/2\langle U, AW^{-1}A^T\rangle$ και στην $F2 = \langle U, AW^{-1}g\rangle$ Για την F1 έχουμε:

Ο πινακας $AW^{-1}A^TU$ ισουται με:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1))+1/W(2))^*U(1)+(-1/W(2))U(2) \\ (-1/W(2))^*U(1)+(+1/W(3)+1/W(2)^*U(2)+(-1/W(3))^*U(3) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ (-1/W(N-1))^*U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))^*U(N-1) \end{bmatrix}$$

Ετσι

$1/2\langle U, AW^{-1}A^T\rangle = 1/2[(1/W(1)+1/W(2))^*U(1)^2+(-1/W(2))^*U(2)^*U(1)+(-1/W(2))^*U(1)^*U(2)+(1/W(2)+1/W(3))^*U(2)^2+(-1/W(3))^*U(3)^*U(2)+\ldots\ldots(-1/W(N-1))^*U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))\ {}^*U(N-1)^2$

οπότε θα ισχύει για το $\nabla F1$:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1)+1/W(2))U(1)+(-1/W(2))U2 \\ (-1/W(2))U(1)+(1/W(2)+1/W(3))U(2)+(-1/W(3))U(3) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ (-1/W(N-1))U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))^*U(N-1) \end{bmatrix}$$

για την $F2 = \langle U, A^*W^{-1}\ {}^*g\rangle$ ισχύει $\nabla F2 = A^*W^{-1}\ {}^*g$.

Επομένως:

$$\begin{bmatrix} g(2)/W(2) - g(1)/W(1) \\ \end{bmatrix}$$

$$\nabla F2 = \begin{bmatrix} g(3)/W(3) - g(2)/W(2) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ g(N)/W(N) - g(N-1)/W(N-1) \end{bmatrix}$$

Συνεπώς: $\nabla F = \nabla F1 + \nabla F2$, δηλαδή θα ισούται με:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1)+1/W(2))^{*}U(1)+(-1/W(2))^{*}U(2)+g(2)/W(2)-g(1)/W(1) \\ (-1/W(2))^{*}U(1)+(1/W(2)+1/W(3))^{*}U(2)+(-1/W(3)^{*}U(3)+g(3)/W(3)-g(2)/W(2) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ -(1/W(N-1)^{*}U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))^{*}U(N-1)+g(N)/W(N)-g(N-1)/W(N-1) \end{bmatrix}$$

Αυτή η τελική μορφή του ∇F είναι αυτή που προγραμματίζεται.

ΣΤ) Αφού λοιπόν δόθηκε η τιμή του ∇F, το επόμενο βήμα είναι ο ελεγχος για το αν για τις τιμές του U μηδενίζονται κάποιες συνιστώσες του ∇F_i για εκείνα τα i που δεν ανήκουν στο J_0. Αν για κάποιο U το $\nabla F_i = 0$ για $i \notin J_0$ και $\nabla F_i \geq 0$ για $i \in J_0$ τότε το συγκεκριμένο U είναι η λύση μας. Αν όμως $\nabla F_i = 0$ για $i \notin J_0$ και $\exists i \in J_0 : \nabla F_i < 0$, αφαιρείται αυτό το i από το J_0 και συνεχίζεται η διαδικασία.

Ζ) Σ' αυτό το στάδιο ακολουθείται η διαδικασία της συζυγούς Gradient για την ελαχιστοποίηση της συναρτήσεως $F(U)= 1/2 \langle U, A^{*}W^{-1*}A^{T*}U \rangle + \langle U, A^{*}W^{-1*}g \rangle$. Γενικά, η μέθοδος που θα δειχθεί δημιουργεί καινούρια U που μηδενίζουν τις συνιστώσεως του ανάδελτα. Η μέθοδος αυτή λοιπόν είναι μία επαναληπτική διαδικασία που αρχίζει από το βήμα 0. Κατά την διαδικασία αυτή πρέπει να υπολογισθεί το διάνυσμα $d_k= -\nabla F(U^k)+B_k d_{k-1}$ (όπου k το βήμα της διαδικασίας). Είναι γνωστή η τιμή $\nabla F(U^k)$, άρα μένει να υπολογισθεί η τιμή B_k.

Ζ1) Η τιμή αυτή όμως δίνεται από τον τύπο $B_k = \| \nabla F(U^k) \|^2 / \| \nabla F(U^{k-1}) \|^2$. Αρχίζουμε λοιπόν από τον υπολογισμό σε κάθε βήμα του μέτρου του ανάδελτα στο τετράγωνο, το οποίο ισούται με $\| \nabla F(U^k) \|^2 =$

$\nabla F_1(U^k)^2 + ... + \nabla F_{N-1}(U^k)^2$ (όπου $\nabla F_i(U^k)^2$ η i συνιστώσα του $\nabla F(U^k)$. Εχοντας αυτές τις τιμές για κάθε βήμα, εύκολα υπολογίζουμε το B_k με διαίρεση της τιμής $||\nabla F(U^k)||^2$ που γνωρίζουμε, σ' αυτό το βήμα με την $||\nabla F(U^{k-1})||^2$ που είναι γνωστό από το προηγούμενο βήμα.

Ζ2) Η επαναληπτική αυτή διαδικασία όμως πρέπει να αρχίζει από κάποιο γνωστό d_0 με την τιμή του οποίου θα βρίσκουμε το πρώτο d_1. Αυτή λοιπόν η τιμή είναι $d_0 = -\nabla F(U^0)$.

Ζ3) Στη συνέχεια γίνεται προσπάθεια να υπολογισθεί η ποσότητα $\lambda^k = -(\langle \nabla F(U^k), d_k \rangle) / \langle d_k, A^* W^{-1} * A^T * d_k \rangle$. Ετσι αρχίζουμε με τον υπολογισμό του $A^* W^{-1} * A^T * d_k$, το οποίο είναι διάνυσμα και το ονομάζουμε S1. Στην συνέχεια υπολογίζονται τα παρακάτω εσωτερικά γινόμενα:

$\langle \nabla F(U^k), d_k \rangle = \nabla F_1(U^k) * d_{K1} + ... + \nabla F_{N-1}(U^k) * d_{K,N-1}$

$\langle d_k, S1 \rangle = (d_k)^1 * S1 + ... + (d_k)^{N-1} * S1_{N-1}$

Αντικαθιστώντας τα αποτελέσματα στον τύπο του λ^k υπολογίζεται η τιμή του συντελεστή.

Ζ4) Για την διεκπεραίωση του αλγορίθμου πρέπει να υπολογισθεί ένας ακόμη συντελεστής λ ο λ^k ο οποίος ισούται με $\lambda^{k*} = \min\{ -U_i^k / d_k^i$ όπου $i \in J \}$ με $J = \{i \notin J_0 : d_k < 0\}$.

Αρχίζουμε λοιπόν τον έλεγχο βλέποντας ποια d_k είναι αρνητικά, κατόπιν διαιρώντας τα αντίστοιχα U_i^k με τα d_k βρίσκω κάποιες τιμές. Η μικρότερη απ' αυτές είναι ο συντελεστής λ^{k*}.

Ζ5) Στη συνέχεια έχω την σύγκριση μεταξύ λ^k και λ^{k*} και ονομάζω $\lambda = \min\{ \lambda^k, \lambda^{k*} \}$ τότε $U_I^{K+1} = U_I^K + \lambda * d_i$ για $i \notin J_0$ και $U_I^{K+1} = U_I^K = 0$ για $i \in J_0$.

Διακρίνονται όμως οι εξής περιπτώσεις:

- Αν $\lambda = \lambda^K$ τότε επιστρέφουμε στο Ζ για να ξεκινήσει το επόμενο βήμα (κ+1) του αλγορίθμου. Η ανακύκλωση αυτή γίνεται μέχρι να βρεθεί κάποιο U_I^{K+1} που να πραγματοποιεί το ελάχιστο της συνάρτησης F.

Επειτα, θέτουμε $U_0 = U_K$ και επιστρέφουμε στο βήμα Γ.

- Αν $\lambda = \lambda_K^*$ τότε ονομάζουμε $U_0 = U_K$ και επιστρέφουμε στο βήμα Γ.

Ο αλγόριθμος σταματά στο βήμα (ΣΤ) όταν ικανοποιούνται οι συνθήκες αυτού του βήματος.

Η) Αφού πάρουμε την βέλτιστη λύση U του δυϊκού προβλήματος, βρίσκουμε την λύση X του κανονικού προβλήματος από τους τύπους

X(1)=(G(1)+U(I-1)-U(I))/W(I) , X(N)=(G(N)+U(N-1))/W(N)

και

X(I)=(G(I)+U(I-1)-U(I))/W(I).

Μοντελοποίηση της μεθόδου συζυγούς διαφορικού στο δυικό πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού για την εφαρμογή της κοίλης παλινδρόμησης.

Τα μόνα στοιχεία που αλλάζουν στη μέθοδο αυτή (σε σχέση με την προηγούμενη), είναι η εισαγωγή του πίνακα A. Σ' αυτή τη μέθοδο ο πίνακας A συμπληρώνεται με τον τρόπο που αναφέρθηκε στην παράγραφο (2.11.2). Η μοντελοποίηση αυτής της εφαρμογής δεν διαφέρει πολύ από την μοντελοποίηση του δυικού προβλήματος της ισοτονικής παλινδρόμησης με την μέθοδο Gradient Conjugue. Συγκεκριμένα τα βήματα A,B, Γ και Δ είναι ακριβώς τα ίδια με μία μικρή διαφοροποίηση στο βήμα B στο οποίο ο πίνακας $A \cdot W^{-1} \cdot A^T$ δεν είναι προκαθορισμένος αλλά βρίσκεται με τον πολλαπλασιασμό αυτών των πινάκων.

Σημαντική διαφορά με την προηγούμενη εφαρμογή υπάρχει στο βήμα E όπου σ' αυτή την περίπτωση δεν υπολογίζεται η τελική μορφή του ανάδελτα διανύσματος, αλλά βρίσκεται εφαρμόζοντας τον τύπο

$$\nabla F(U) = A \cdot W^{-1} \cdot A^T \cdot U + A \cdot W^{-1} \cdot g .$$

Τα επόμενα βήματα, ΣΤ και Z είναι ακριβώς τα ίδια.

H) Για να παρουμε από το βέλτιστο U^* του δυικού προβλήματος το βέλτιστο X^* του αρχικού προβλήματος, πολλαπλασιάζουμε τους πίνακες $W^{-1} \cdot A^T \cdot u^*$, $W^{-1} \cdot g$ και στη συνέχεια αφαιρούμε το πρωτο από το δεύτερο. Ετσι έχουμε το βέλτιστο X^*:

$$X^* = - W^{-1} A^T u + W^{-1} g$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΥΠΟΔΙΑΦΟΡΙΚΟΥ

Σε προβλήματα βελτιστοποίησης όπου η συνάρτηση έχει ασυνεχή πρώτη παράγωγο και οι κλασσικές μέθοδοι αποτυγχάνουν, χρησιμοποιείται η nonsmooth βελτιστοποίηση.

Ας θεωρηθεί το πρόβλημα

$$\min f(x)$$

με f κοίλη, μη διαφορίσιμη συνάρτηση.

Σε μια κλασσική μέθοδο, πραγματοποιείται ένα θετικό βήμα t_k κατά μήκος του αρνητικού ανάδελτα: $x_{k+1} = x_k - t_k \nabla f(x_k)$

(3.1.)

$t_k > 0$ έρευνα γραμμής.

Η κατεύθυνση $-\nabla f(x_k)$ είναι μια κατεύθυνση καθόδου, γι' αυτό η έρευνα γραμμής κατά μήκος της $x_k - t \nabla f(x_k)$, $t \geq 0$ σκοπεύει στο να βρει το καλύτερο $t_k > 0$ τέτοιο ώστε:

$$f(x_{k+1}) < f(x_k)$$

Για nonsmooth συνάρτηση f, το ανάδελτα στο x_k μπορεί να μην υπάρχει. Συμπεραίνουμε ότι σε κάθε x γνωρίζουμε την τιμή f(x) και ένα $g \in \partial f(x)$, συνεπώς ξέρουμε ένα subgradient στη x_k. Αρα είναι δυνατόν στην (3.1.) να αντικατασταθεί το ανάδελτα με ένα subgradient g_k.

Διαλέγουμε $g_k \in \partial f(x)$ και θέτουμε:

$$d_k = - g_k / |g_k|$$

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k.$$

Απομένει να βρούμε πως θα διαλέξουμε το t_k.

Καταλήγουμε στον παρακάτω αλγόριθμο βελτιστοποίησης με μη διαφορίσιμα δεδομένα.

Βήμα 1ο : $g_k = \nabla f(x_k)$

Βήμα 2ο: $d_k = - g_k / |g_k|$

Βήμα 3ο : $t_k = 1/(\kappa+1), \kappa =$ αριθμός τρέχουσας επανάληψης

Βήμα 4ο: $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$

Ο παραπάνω αλγόριθμος είναι αρκετά εύχρηστος αλλά αργός. Τον βελτιώνουμε σε δύο σημεία: α) στη διεύθυνση που θα ακολουθείται στην εκάστοτε επανάληψη και β) στο βήμα που θα καθορίζει πόσο θα προχωρά στη συγκεκριμένη διεύθυνση σε κάθε επανάληψη.

Συγκεκριμένα, έστω:

$$\max_x f(x) \qquad (3.2.)$$

όπου $f(x) = \min \{c_m + x\,\mu_m\}$

με $m \in \{1, 2, ..., M\}$ $\quad x \in R^n$

$c_m \in R$ $\quad \mu_m \in R^n$

Το παραπάνω πρόβλημα είναι ισοδύναμο με

$$\max \{f: f \leq c_m + x\,\mu_m \quad \text{για κάθε } m\}$$

δηλαδή είναι ένα πρόβλημα γραμμικού προγραμματισμού.

Στην μορφή (3.2.) το πρόβλημα λύνεται με επαναλήψεις του συνδυασμού:

$$x_0 = 0 \qquad (3.3.)$$

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k \qquad (3.4.)$$

με t_k μια ακολουθία βαθμωτών.

Μια προφανής επιλογή για το d_k είναι το ανάδελτα της f(x).

Αρα:

$$d_k = \nabla f(x) \qquad (3.5.)$$

Παρατηρείται ότι ο συνδυασμός των (3.3),(3.4) και (3.5) έχει σαν σκοπό να φτάσει όλο και πιο κοντά στην βέλτιστη περιοχή έτσι ώστε, η αντικειμενική συνάρτηση να μην χρειάζεται να βελτιώνεται σε κάθε επαναληπτικό βήμα.

Σκοπός μας δεν είναι να επιμείνουμε στην παραπάνω διεύθυνση, αλλά να επιτευχθεί όσο το δυνατόν καλύτερα μία τροποποιημένη διεύθυνση του ανάδελτα. Μια επιλογή για πιο γρήγορη σύγκλιση της μεθόδου είναι η εξής:

$$d_k = \nabla f(x) + b_k d_{k-1}$$

$$\text{για} \quad \kappa = 0 \;\; \text{και} \;\; d_{k-1}$$

Θα δοθούν παρακάτω κάποιες ιδιότητες που θα οδηγήσουν σε μια επιλογή των b_k και t_k. Λόγω του ότι η κατεύθυνση του ανάδελτα της $f(x_k)$ σχηματίζει πάντα οξεία γωνία με την διεύθυνση της ευθείας του τρέχοντος x_k και του βέλτιστου x^* ισχύει ότι:

Λήμμα 3.1.

Αν x^* και x_k τέτοια ώστε:

$$f^* = f(x^*) \geq f(x_k) = f_k \quad ,$$

τότε

$$(x^* - x_k)\,\nabla f(x_k) \geq f^* - f_k \geq 0.$$

Αρα, η διεύθυνση d_k στο τρέχον σημείο θα αποδειχθεί ότι σχηματίζει πάντα οξεία γωνία με την κατεύθυνση που ορίζεται από το διάνυσμα που σχηματίζεται στην ευθεία του τρέχοντος x_k και του βέλτιστου x^* σημείου.

Λήμμα 3.2.

Εστω

$$0 \leq t_k \leq \frac{f^* - f_k}{|d_k|^2} \qquad (3.6.)$$

και

$$b_k \geq 0 \; ,$$

τότε $(x^* - x_k)\, d_k \geq (x^* - x_k)\, \nabla f(x_k)$.

Από το παρακάτω θεώρημα συμπεραίνεται ότι με κατάλληλη επιλογή των b_k ή d_k, η διεύθυνση είναι πάντα τουλάχιστον τόσο καλή όσο και το ανάδελτα του f_k.

Θεώρημα 3.1.

Αν είναι

$$b_k = \begin{cases} -\gamma_k \dfrac{d_{k-1}\cdot\nabla f(x_k)}{|d_{k-1}|^2} & \text{αν } d_{k-1}\cdot\nabla f(x_k) < 0 \\ & \text{αλλιως,} \\ 0 & \text{με } 0 \leq \gamma_k \leq 2 \end{cases}$$

τότε

$$\frac{(x^* - x_k)\cdot d_k}{|d_k|} \geq \frac{(x^* - x_k)\cdot\nabla f(x_k)}{|\nabla f(x_k)|}$$

Το επόμενο θεώρημα, εγγυάται ότι σε κάθε επανάληψη ερχόμαστε όλο και πιο κοντά στο βέλτιστο σημείο.

Θεώρημα 3.2.

$$|x^* - x_k| > |x^* - x_{k+1}|$$

Με βάση τα παραπάνω μπορούν να σημειωθούν τα εξής: αν τα διανύσματα του $\nabla f(x_k)$ και d_{k-1} είναι αντίρροπα ($\nabla f(x_k)\, d_{k-1} < 0$) οπότε το b_k είναι θετικό, έχουμε σαν καινούρια διεύθυνση το διανυσματικό άθροισμα των $f(x)$ και d_{k-1} :

$$d_k = \nabla f(x_k) + b_k\, d_{k-1}$$

ενώ, στην αντίθετη περίπτωση που $\nabla f(x_k)$ και d_{k-1} είναι ομόρροπα, οπότε $b_k=0$, τότε η κανούρια διεύθυνση ταυτίζεται με το $f(x_k)$.

Τέλος, ορίζεται σαν t_k αυτό που δίνεται στο Λήμμα 3.2 και στην σχέση (3.6.) αν και αυτό είναι αρκετά περιοριστικό, ενώ το γ_k από το Θεώρημα 3.1 ορίζεται ως:

$$0 \le \gamma_k \le 2$$

Μετά από μελέτη επιλέχθηκε $\gamma_k = 1.5$.

Επομένως ο βελτιωμένος αλγόριθμος έχει ως εξής:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ

Βήμα 1

$$d_k = \nabla f(x_k) + b_k\, d_{k-1}$$

Βήμα 2

$$b_k = \begin{cases} -1.5\,\dfrac{d_{k-1}\cdot\nabla f(x_k)}{|d_{k-1}|^2} & \text{αν} \quad d_{k-1}\cdot\nabla f(x_k) < 0 \\ 0 & \end{cases}$$

Βήμα 3

$$x_{k+1} = x_k + t_k\, d_k$$

Ο αλγόριθμος δουλεύει με :

$$t_k = \frac{f^* - f(k)}{|d_k|^2}$$

Στο αρχικό σημείο κ=0 έχουμε

$$d_{k-1} = 0 \Rightarrow d_0 \equiv \nabla f(x_0)$$

Μοντελοποίηση του δυϊκού προβλήματος του τετραγωνικού προγραμματισμού για την εφαρμογή της ισοτονικής παλινδρόμησης.

Κατά την μοντελοποίηση της τροποποιημένης μεθόδου του υποδιαφορικού για την εφαρμογή της ισοτονικής παλινδρόμησης στο δυϊκό πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού, ακολουθούνται τα εξής στάδια:

Α) Εισαγωγή του διανύσματος G και των βαρών W(I).

Β) Καθορισμός του πίνακα $A^{*}W^{-1*}A^{T}$.

Γ) Καθορισμός του αρχικού διανύσματος U. Στην περίπτωσή μας U(I)=0 , I=1,2,...,N-1.

Δ) Καθορισμός του ανάδελτα διανύσματος που γίνεται σύμφωνα με τον παρακάτω τρόπο :

Είναι γνωστό ότι η συνάρτηση F έχει τη μορφή:

$$F(U)=1/2\langle U,AW^{-1}A^{T}U\rangle+\langle U,AW^{-1}g\rangle$$

Επειδή οι πίνακες A και W όπως έχει ήδη προαναφερθεί έχουν πολύ απλή μορφή, θεωρήθηκε προτιμότερο να γίνουν οι πράξεις της F(u) με τις γνωστές τιμές των πινάκων και να δοθεί μία τελική μορφή στο ανάδελτα διάνυσμα η οποία θα προγραμματιστεί. Χωρίζουμε λοιπόν τη συνάρτηση σε δύο επιμέρους συναρτήσεις: στην $F1 =1/2\langle U,AW^{-1}A^{T}\rangle$ και στην $F2.=\langle U,AW^{-1}g\rangle$.

Στην προσπάθεια να υπολογιστεί η F1, ακολουθείται η εξής διαδικασία:

Ο πινακας $AW^{-1}A^{T}U$ ισουται με:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1))+1/W(2))^{*}U(1)+(-1/W(2))U(2) \\ (-1/W(2))^{*}U(1)+(+1/W(3)+1/W(2)^{*}U(2)+(-1/W(3))^{*}U(3) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ (-1/W(N-1))^{*}U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))^{*}U(N-1) \end{bmatrix}$$

Ετσι

$1/2\langle U,AW^{-1}A^T\rangle=1/2[(1/W(1)+1/W(2))*U(1)^2+(-1/W(2))*U(2)*U(1)+(-1/W(2))*U(1)*U(2)+(1/W(2)+1/W(3))*U(2)^2+(-1/W(3))*U(3)*U(2)+.........(-1/W(N-1))*U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))*U(N-1)^2$

οπότε θα έχουμε για το $\nabla F1$:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1)+1/W(2))U(1)+(-1/W(2))U2 \\ (-1/W(2))U(1)+(1/W(2)+1/W(3))U(2)+(-1/W(3))U(3) \\ \cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots \\ (-1/W(N-1))U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))*U(N-1) \end{bmatrix}$$

για την $F2=\langle U,A*W^{-1}*g\rangle$ ισχύει $\nabla F2=A*W^{-1}*g$.

Επομένως:

$$\nabla F2 = \begin{bmatrix} g(2)/W(2) - g(1)/W(1) \\ g(3)/W(3) - g(2)/W(2) \\ \cdots\cdots\cdots \\ g(N)/W(N) - g(N-1)/W(N-1) \end{bmatrix}$$

Συνεπώς: $\nabla F = \nabla F1 + \nabla F2$, δηλαδή θα ισούται με:

$$\begin{bmatrix} (1/W(1)+1/W(2))*U(1)+(-1/W(2))*U(2)+g(2)/W(2)-g(1)/W(1) \\ (-1/W(2))*U(1)+(1/W(2)+1/W(3))*U(2)+(-1/W(3)*U(3)+g(3)/W(3)-g(2)/W(2) \\ \cdots\cdots\cdots \\ -(1/W(N-1)*U(N-2)+(1/W(N-1)+1/W(N))*U(N-1)+g(N)/W(N)-g(N-1)/W(N-1) \end{bmatrix}$$

Αυτή η τελική μορφή του ∇F είναι αυτή που προγραμματίζεται.

Ε) Σ' αυτό το στάδιο ακολουθείται η διαδικασία για την τροποποιημένη μέθοδο υποδιαφορικού για την εύρεση ελαχίστου της f(U). Αυτό επιτυγχάνεται βελτιώνοντας κάθε φορά το U(I) κατά $U_{K+1} = U_K + t(K)^{*} d(K,I)$. Οπου d(K,I) είναι η I συνιστώσα του βήματος K και αποτελεί την κατεύθυνση που ακολουθεί το U_{K+1} προκειμένου να φτάσει στο μέγιστο της συναρτήσεως. Για να βρεθεί λοιπόν ο συντελεστής ακολουθούνται τα εξής στάδια:

- για κ=0 $d(0,I) = \nabla F(U^0)$

-για το κ βήμα υπολογίζουμε $d(K,I) = \nabla F(U^k) + b(K,I) * d(K-1,I)$.

Ο συντελεστής βρίσκεται ως εξής :

$$b(K,I) = \begin{cases} [-1.5^{*} d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^k)] / |d_{k-1}|^2 & \text{αν } d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^k) < 0 \\ 0 & \end{cases}$$

Στον παραπάνω τύπο όμως υπάρχει και ο συντελεστής t(K) της διευθύνσεως d(K,I). Ο συντελεστής αυτός βρίσκεται από τον τύπο $t(K) = (f^{*} - f(k)) / |d_k|^2$.

Αρχίζει ο έλεγχος βρίσκοντας για ποια I ισχύει $d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^k) < 0$.

Στην συνέχεια δίνονται στα b(K,I) οι παραπάνω τιμές και σύμφωνα με τους προαναφερόμενους τύπους υπολογίζονται διαδοχικά τα d(K,I), t(K) και τέλος U_{K+1}.

Η μόνη ιδιαιτερότητα βρίσκεται στον υπολογισμό του f^{*} στον τύπο του t(K). Στη θέση αυτού αντικαθιστούμε την μεγαλύτερη τιμή των f(U). Κάθε φορά όμως που ισχύει $f(U_{k+1}) > f(U_k)$ παίρνουμε t(K) = 1/k+1.

ΣΤ) Ο αλγόριθμος σταματά και δίνει τα βέλτιστα U όταν $|f(U_{k+1}) - f(U_k)| < 10^{-7}$

Ζ) Από τα U(I) υπολογίζονται τα X(I) σύμφωνα με τους τύπους :

X(1)=(G(1)+U(I-1)-U(I))/W(I) , X(N)=(G(N)+U(N-1))/W(N)

και

X(I)=(G(I)+U(I-1)-U(I))/W(I).

Σημείωση : Ο αλγόριθμος αυτός υπολογίζει το μέγιστο μιας συναρτήσεως F(U). Για να υπολογισθεί το ελάχιστο της συναρτήσεως F(U), υπολογίζεται το μέγιστο της συναρτήσεως $-F(U)$. Ετσι στο συγκεκριμένο παράδειγμα που θέλουμε να υπολογισθεί το ελάχιστο της $F(U)=1/2\langle U,AW^{-1}A^T\rangle+\langle U,AW^{-1}\rangle$ υπολογίζεται αντί γι' αυτό το μέγιστο της $-F(U)=-(1/2\langle U,AW^{-1}A^T\rangle+\langle U,AW^{-1}\rangle)$.

Μοντελοποίηση του δυικού προβλήματος του τετραγωνικού προγραμματισμού για την εφαρμογή της κοίλης παλινδρόμησης.

Κατά την μοντελοποίηση της τροποποιημένης μεθόδου υποδιαφορικού γιακ την εφαρμογή της κοίλης παλινδρόμησης στο δυικό πρόβλημα του τετραγωνικού προγραμματισμού, ακολουθούνται τα εξής στάδια:

Α) Εισαγωγή των διανυσμάτων G και Y καθώς και των βαρων W(I).

Β) Πολλαπλασιασμός των ακόλουθων πινάκων :

$A^{*}W^{-1} = A1, \quad A^{T} = A2, \quad A1^{*} A2 = A3$

ώστε να λάβουμε τελικά τον πίνακα $A1^{*}A2^{*}U = A^{*}W^{-1} {}^{*}A^{T} {}^{*}U$

Στην συνέχεια παίρνουμε τον πίνακα $A^{*}W^{-1*}g = A1^{*}g$.

Γ) Καθορισμός του αρχικού διανύσματος U . Στην περίπτωσή μας U(I)=0 για I=1,2,...,N-1.

Δ) Υπολογισμός του ανάδελτα διανύσματος σύμφωνα με τον τύπο

$$\nabla F(u) = A^{*}W^{-1} {}^{*}A^{T} {}^{*}U$$

$+ \ A^{*}W^{-1*}g.$

Ε) Σ' αυτό το στάδιο ακολουθείται η διαδικασία για την τροποποιημένη μέθοδο υποδιαφορικού για την εύρεση ελαχίστου της f(U). Αυτό επιτυγχάνεται βελτιώνοντας κάθε φορά το U(I) κατά $U_{K+1} = U_{K} + t(K)^{*}d(K,I)$. Οπου d(K,I) είναι η I συνιστώσα του βήματος K και αποτελεί την κατεύθυνση που ακολουθεί το U_{K+1} προκειμένου να φτάσει στο μέγιστο της συναρτήσεως. Για να βρεθεί λοιπόν ο συντελεστής ακολουθούνται τα εξής στάδια:

- για κ=0 $d(0,I) = \nabla F(U^{0})$

-για το κ βήμα υπολογίζουμε $d(K,I) = \nabla F(U^{k}) + b(K,I) {}^{*} d(K-1,I)$.

Ο συντελεστής βρίσκεται ως εξής :

$$b(K,I) = \begin{cases} [-1.5^{*} d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^{k})] \,/\, |d_{k-1}|^{2} & \text{αν } d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^{k}) < 0 \\ \\ 0 & \end{cases}$$

Στον παραπάνω τύπο όμως υπάρχει και ο συντελεστής t(K) της διευθύνσεως d(K,I) . Ο συντελεστής αυτός βρίσκεται από τον τύπο $t(K) = (f^{*} - f(k)) \,/\, |d_{k}|^{2}$.

Αρχίζει ο έλεγχος βρίσκοντας για ποια I ισχύει $d(K-1,I)^{*} \nabla F(U^{k}) < 0$.

Στην συνέχεια δίνονται στα b(K,I) οι παραπάνω τιμές και σύμφωνα με τους προαναφερόμενους τύπους υπολογίζονται διαδοχικά τα d(K,I), t(K) και τέλος U_{K+1}.

Η μόνη ιδιαιτερότητα βρίσκεται στον υπολογισμό του f^* στον τύπο του t(K). Στη θέση αυτού αντικαθιστούμε την μεγαλύτερη τιμή των f(U). Κάθε φορά όμως που ισχύει $f(U_{k+1}) > f(U_k)$ παίρνουμε t(K) = 1/k+1.

ΣΤ) Για να παρουμε από το βέλτιστο U^* του δυικού προβλήματος το βέλτιστο X^* του αρχικού προβλήματος, πολλαπλασιάζουμε τους πίνακες $W^{-1} \cdot A^T \cdot u^*$, $W^{-1} \cdot g$ και στη συνέχεια αφαιρούμε το πρωτο από το δεύτερο. Ετσι έχουμε το βέλτιστο X^* :

$$X^* = -W^{-1}A^Tu + W^{-1}g$$

Σημείωση : Ο αλγόριθμος αυτός υπολογίζει το μέγιστο μιας συναρτήσεως F(U). Για να υπολογισθεί το ελάχιστο της συναρτήσεως F(U), υπολογίζεται το μέγιστο της συναρτήσεως -F(U) . Ετσι στο συγκεκριμένο παράδειγμα που θέλουμε να υπολογισθεί το ελάχιστο της $F(U)=1/2\langle U,AW^{-1}A^T\rangle+\langle U,AW^{-1}\rangle$ υπολογίζεται αντί γι' αυτό το μέγιστο της $-F(U)=-(1/2\langle U,AW^{-1}A^T\rangle+\langle U,AW^{-1}\rangle)$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Σ' αυτό το κεφάλαιο αναπτύσσεται η εφαρμογή των προγραμμάτων της ισοτονικής και της κοίλης παλινδρόμησης για τις μεθόδους Dykstra και τετραγωνικού προγραμματισμού οι εφαρμογές του οποίου για την ισοτονική και κοίλη παλινδρόμηση θα επιλυθούν με την μέθοδο συζυγούς διαφορικού και την τροποποιημένη μέθοδο υποδιαφορικού. Παράλληλα με την εφαρμογή θα γίνει και η σύγκριση των μεθόδων αυτών.

Εφαρμογές.

Για την ισοτονική παλινδρόμηση οι εφαρμογές πραγματοποιούνται με τα ακόλουθα διανύσματα:

G = (1.2 , 4 , 1.5 , 2 , 3 , 2 , 1.8 , 3 , 4 , 1.6 , 1 , 2.3 , 2.8 , 4 , 3.2 , 3.1 , 4.2 , 5 , 2 , 1 , 2.2 , 1 , 1.5 , 1.8 , 1.6 , 1.8 , 1.6 , 1 , 2 , 2.1)

W = (1,1,...,1).

Για την κοίλη παλινδρόμηση, οι εφαρμογές πραγματοποιούνται με τα ακόλουθα διανύσματα:

G = (1.2 , 1.3 , 1.1 , 1 , 2.3 , 2.2 , 2.1 , 2.4 , 2 , 3.5 , 3.2 , 2.3 , 3.2 , 3.1 , 4)

W = (1,1,...,1)

Y = (1.1 , 1.2 , 1.3 , 1.4 , 1.5 , 1.7 , 1.9 , 2 , 2.4 , 2.5 , 2.8 , 3 , 3.5 , 3.8 , 4).

Τα παραπάνω διανύσματα καταχωρήθηκαν σε υπολογιστή με τα αντίστοιχα ονόματα : ARXEIOG, ARXEIOW, ARXEIOY.

Η σύγκριση των μεθόδων θα γίνει με βάση δύο γεγονότα:

α) Κατά πόσο τα σημεία που δίνουν τα προγράμματα, ικανοποιούν τους περιορισμούς (δηλαδή έχουμε σωστά αποτελέσματα).

β) Ποια αποτελέσματα X δίνουν την μικρότερη τιμή στην συνάρτηση

Για ευκολότερη σύγκριση των αλγορίθμων, τυπώνονται τα αποτελέσματα X κάθε προγράμματος σε αρχείο (ARXEIOX), το οποίο στη συνέχεια διαβάζεται από το πρόγραμμα I8. Το I8 υπολογίζει την τιμή της συνάρτησης

$$F = \sum_{i=1}^{n} w_i (g_i - x_i)^2$$

Ετσι λοιπόν προκύπτουν τα παρακάτω αποτελέσματα:

Εφαρμογή της ισοτονικής παλινδρόμησης:

Για 5 σημεία.

	W	G	Dykstra	συζ.διαφ.	Υποδιαφορικό
	1	1.2	1.2	1.2	1.89
	1	4	2.5	2.5	2.05
	1	1.5	2.5	2.5	2.34
	1	2	2.5	2.5	2.62
	1	3	3	3	2.78
F			3.5	3.5	5.42

Για 10 σημεία.

	W	G	Dykstra	συζ.διαφ.	Υποδιαφορικό
	1	1.2	1.2	1.2	2.29
	1	4	2.38	2.38	2.30
	1	1.5	2.38	2.38	2.32
	1	2	2.38	2.38	2.35
	1	3	2.38	2.38	2.38
	1	2	2.38	2.38	2.42
	1	1.8	2.38	2.38	2.46
	1	3	2.86	2.86	2.49
	1	4	2.86	2.86	2.51
	1	1.6	2.86	2.86	2.52
F			7.31	7.31	9.19

Για 15 σημεία.

W	G	Dykstra	συζ.διαφ.	Υποδιαφορικό
1	1.2	1.2	1.2	2.47
1	4	2.38	2.38	2.54
1	1.5	2.38	2.38	2.38
1	2	2.38	2.38	2.71
1	3	2.38	2.38	2.25
1	2	2.38	2.38	2.63
1	1.8	2.38	2.38	2.40
1	3	2.38	2.38	2.62
1	4	2.38	2.38	2.36
1	1.6	2.38	2.38	2.58
1	1	2.38	2.38	2.33
1	2.3	2.38	2.38	2.74
1	2.8	2.8	2.8	2.24
1	4	3.6	3.6	2.64
1	3.2	3.6	3.6	2.42
E		10.25	10.25	

Για 20 σημεία.

	W	G	Dykstra	συζ.διαφ.
	1	1.2	1.2	1.2
	1	4	2.38	2.38
	1	1.5	2.38	2.38
	1	2	2.38	2.38
	1	3	2.38	2.38
	1	2	2.38	2.38
	1	1.8	2.38	2.38
	1	3	2.38	2.38
	1	4	2.38	2.38
	1	1.6	2.38	2.38
	1	1	2.38	2.38
	1	2.3	2.38	2.38
	1	2.8	2.8	2.8
	1	4	3.21	3.21
	1	3.2	3.21	3.21
	1	3.1	3.21	3.21
	1	4.2	3.21	3.21
	1	5	3.21	3.21
	1	2	3.21	3.21
	1	1	3.21	3.21
F			21.10	21.10

Για 25 σημεία.

W	G	Dykstra	συζ.διαφ.
1	1.2	1.2	1.2
1	4	2.38	2.38
1	1.5	2.38	2.38
1	2	2.38	2.38
1	3	2.38	2.38
1	2	2.38	2.38
1	1.8	2.38	2.38
1	3	2.38	2.38
1	4	2.38	2.38
1	1.6	2.38	2.38
1	1	2.38	2.38
1	2.3	2.38	2.38
1	2.8	2.72	2.56
1	4	2.72	2.56
1	3.2	2.72	2.56
1	3.1	2.72	2.56
1	4.2	2.72	2.56
1	5	2.72	2.56
1	2	2.71	2.56
1	1	2.71	2.56
1	2.2	2.71	2.56
1	1	2.61	2.56
1	1.5	2.49	2.56
1	1.8	2.26	2.56
1	1.6	1.6	2.56
			29.34

F

Για 30 σημεία.

	W	G	συζυγ.διαφορισn
	1	1.2	1.2
	1	4	2.34
	1	1.5	2.34
	1	2	2.34
	1	3	2.34
	1	2	2.34
	1	1.8	2.34
	1	3	2.34
	1	4	2.34
	1	1.6	2.34
	1	1	2.34
	1	2.3	2.34
	1	2.8	2.34
	1	4	2.34
	1	3.2	2.34
	1	3.1	2.34
	1	4.2	2.34
	1	5	2.34
	1	2	2.34
	1	1	2.34
	1	2.2	2.34
	1	1	2.34
	1	1.5	2.34
	1	1.8	2.34
	1	1.6	2.34
	1	1.8	2.34
	1	1.6	2.34
	1	1	2.34
	1	2	2.34
	1	2.1	2.34
E			32.85

Συμπεράσματα.

Από την εφαρμογή για τα 5 σημεία, παρατηρείται ότι οι μέθοδοι Dykstra και του συζυγούς διαφορικού δίνουν τα καλύτερα αποτελέσματα, ενώ η τροποποιημένη μέθοδος του υποδιαφορικού τα χειρότερα. Συγκεκριμένα τα σημεία αυτά δίνουν στην συνάρτηση F τις τιμές 3,5 για τις μεθόδους Dykstra και συζυγούς διαφορικού και 5,42 για την βελτιωμένη μέθοδο υποδιαφορικού.

Το πρόβλημα γίνεται εντονότερο στην εφαρμογή των 15 σημείων όπου μετά το τρίτο σημείο δεν τηρούνται οι περιορισμοί :

$X_i \leq X_{i+1}$ για $i=1,2,...,n-1$,

αδυνατεί δηλαδή να δώσει σωστά αποτελέσματα.

Οι πιο πιθανοί λόγοι που κάνουν αυτή τη μέθοδο μειονεκτικότερη, είναι οι εξής:

A) Ενώ η μέθοδος ξεκινά από ένα αρχικό $U_0 = (0,0,...,0)$, δεν αναθεωρείται αυτό κάθε φορά που συμβαίνει προσέγγιση ακρότατου (όπως στην μέθοδο συζυγούς διαφορικού). Ετσι η επαναληπτική διαδικασία δεν ξαναρχίζει από την αρχή (κ=0).

B) Ο τύπος $d_k = \nabla f(x_k) + b_k d_{k-1}$ αναγκάζει να συγκρατείται το διάνυσμα d σε δισδιάστατο πίνακα. Η μία διάσταση περιέχει την συνιστώσα του διανύσματος και η άλλη το βήμα της επανάληψης. Αν υποτεθεί ότι οι εφαρμογές γίνονται μέχρι 30 σημεία, τότε έχουμε και τον εξής περιορισμό: η FORTRAN δέχεται πίνακα διαστάσεων μέχρι 30 X 3.500. Ετσι οι επαναλήψεις που μπορούν να πραγματοποιηθούν είναι το πολύ 3.500, προφανώς όχι αρκετές για να ληφθούν σωστά αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις.

Για τις άλλες δύο μεθόδους, διαπιστώθηκαν τα εξής:

Οι μέθοδοι Dykstra και συζυγούς διαφορικού στις εφαρμογές μέχρι και 20 σημείων, δίνουν τα ίδια αποτελέσματα.

Στα 25 σημεία όμως, στη μέθοδο Dykstra, μετά το 18ο σημείο, δεν τηρούνται οι περιορισμοί. Αυτό συμβαίνει γιατί οι 1.000.000 ανακυκλώσεις που ορίστηκαν σαν όριο, δεν στάθηκαν αρκετές. Το ποσό του 1.000.000 ανακυκλώσεων επιλέχθηκε ώστε το πρόγραμμα να μην "τρέχει" πάνω από 15 λεπτά. Για 10.000.000 ανακυκλώσεις, προέκυψαν σωστά αποτελέσματα αλλά μετά από 1,5 ώρες,γι' αυτό και δεν θεωρήθηκε απαραίτητο να αναφερθεί σ' αυτή την σύγκριση.

Επομένως, η μέθοδος αυτή παρουσιάζει μειονέκτημα στο ότι χρειάζεται πολύ μεγάλο αριθμό ανακυκλώσεων για να υπολογίσει σωστά αποτελέσματα.

Τέλος, η μέθοδος του συζυγούς διαφορικού παρουσιάζεται καλύτερη από τις άλλες δύο. Δίνει σωστά αποτελέσματα ακόμα και για 30 σημεία , ενώ κάνει εκατοντάδες προσεγγίσεις και περίπου 13 λεπτά για τον υπολογισμό τους. Δεν εκτελει όμως και τις 3.500 επαναλήψεις . Στην συγκεκριμένη εφαρμογή χρειάστηκε μέχρι 476 .

Εφαρμογή της κοιλής παλινδρόμησης.

Για 5 σημεία.

	W	Y	G	Dykstra	συζ.διαφ.	Υποδιαφορικό
	1	1.1	1.2	1.17	0.99	0.97
	1	1.2	1.3	1.17	1.19	0.99
	1	1.3	1.1	1.18	1.38	1.02
	1	1.4	1	1.3	1.57	1.13
	1	1.5	2.3	2.05	1.76	1.52
F				0.17	0.74	1.05

Για 8 σημεία.

W	Y	G	Dykstra	συζ.διαφ.	Υποδιαφορικό
1	1.1	1.2	1.17	0.99	0.97
1	1.2	1.3	1.17	1.18	1.02
1	1.3	1.1	1.18	1.38	1.12
1	1.4	1	1.30	1.57	1.62
1	1.5	2.3	2.05	1.76	1.40
1	1.7	2.2	2.20	2.14	1.31
1	1.9	2.1	2.10	2.24	2.10
1	2	2.4	2.40	2.30	2.40
				7.82	

Για 10 σημεία μετά από συνεχείς προσεγγίσεις το πρόγραμμα για την μέθοδο του συζυγούς διαφορικού μπαίνει σε ανακύκλωση χωρίς να μπορεί να βγει απ' αυτήν. Το ίδιο συμβαίνει και για περισσότερα σημεία.

Συμπεράσματα.

Σ' αυτή την περίπτωση παρατηρείται ότι για την εφαρμογή των 5 σημείων, τα σωστότερα αποτελέσματα τα δίνει η μέθοδος Dykstra. Συγκεκριμένα, δίνουν στην συνάρτηση F την τιμή 0,17 που είναι μεγαλύτερη από αυτή των άλλων μεθόδων. Στα 8 σημεία όμως, η μέθοδος αυτή δίνει λάθος αποτελέσματα. Η εφαρμογή στην συγκεκριμένη περίπτωση, έγινε για 50.000

επαναλήψεις με τις οποίες το πρόγραμμα κάνει 15 λεπτά να δώσει αποτελέσματα. Τα ίδια αποτελέσματα διατηρούνται για 200.000 και 300.000 επαναλήψεις.

Συμπεραίνεται λοιπόν ότι το βασικό μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι οι πολλές επαναλήψεις που απαιτούνται για να υπολογισθούν τα βέλτιστα X.

Για την τροποποιημένη μέθοδο υποδιαφορικού παρατηρείται ότι για την εφαρμογή των 5 σημείων, δεν δίνει τα καλύτερα αποτελέσματα ενώ για την εφαρμογή των 8 σημείων, τα αποτελέσματα είναι λάθος. Αυτό οφείλεται στα μειονεκτήματα που ήδη αναφέρθηκαν στα συμπεράσματα της ισοτονικής παλινδρόμησης για την μέθοδο αυτή.

Για την μέθοδος συζυγούς διαφορικού, ενώ έχει χειρότερα αποτελέσματα από την μέθοδο Dykstra στην εφαρμογή των 5 σημείων, μπορεί και δίνει αποτελέσματα για την εφαρμογή των 8 σημείων. Συμπεραίνεται λοιπόν ότι αν και δεν είναι η βέλτιστη μέθοδος, είναι πιο αξιόπιστη και επομένως η πλέον προτεινόμενη για εφαρμογή.

ΕΠΙΛΟΓΟΣ

Τα προβλήματα της ισοτονικής και της κοίλης παλινδρόμησης προσεγγίστηκαν σ' αυτή την εργασία, όπως έχει ήδη ειπωθεί, με τους ακόλουθους τρόπους:

A) Ως εφαρμογές της μεθόδου Dykstra

B) Ως εφαρμογές του δυικού προβλήματος του τετραγωνικού προγραμματισμού οι οποίες επιλύθηκαν με τις μεθόδους του συζυγούς διαφορικού και με την τροποποιημένη μέθοδο υποδιαφορικού.

Οι εφαρμογές αυτές στην συνέχεια μοντελοποιήθηκαν και προγραμματίστηκαν οι αλγόριθμοι σε γλώσσα FORTRAN 77.

Με την βοήθεια λοιπόν αυτών των προγραμμάτων, πραγματοποιήθηκε η εφαρμογή και κατ' επέκταση η σύγκριση αυτών των μεθόδων.

Από τα αποτελέσματα που ελήφθησαν, διαπιστώθηκε ότι προτιμότερη μέθοδος για την επίλυση των προβλημάτων ισοτονικής και κοίλης παλινδρόμησης, είναι αυτή του συζυγούς διαφορικού που επιλύει τις εφαρμογές του δυικού προβλήματος του τετραγωνικού προγραμματισμού.

Αυτό συνέβη γιατί στην ισοτονική παλινδρόμηση λαμβάνονται αποτελέσματα για την εφαρμογή περισσοτέρων σημείων απ' ότι για τις άλλες μεθόδους και συγχρόνως τα αποτελέσματα αυτά είναι τα βέλτιστα.

Στη δε κοίλη παλινδρόμηση, δεν λαμβάνονται βέλτιστα αποτελέσματα, αλλά η εφαρμογή πραγματοποιείται για μεγαλύτερο αριθμό σημείων. Επιπλέον πρέπει να σημειώσουμε ότι αυτή η μέθοδος, για την εφαρμογή ίδιου αριθμού σημείων, δίνει τα αποτελέσματα πιο γρήγορα (σε χρόνο που χρειάζεται ο υπολογιστής για να δώσει αποτελέσματα).

Τα παραπάνω πλεονεκτήματα λοιπόν, συνιστούν την μέθοδο αυτή ως προτιμότερη για εφαρμογή.

Θεωρείται όμως σκόπιμο, να εξεταστεί περαιτέρω η εφαρμογή και άλλων μεθόδων βελτιστοποίησης, διότι όπως φαίνεται, δίνουν καλύτερα αποτελέσματα από τις αντίστοιχες στατιστικές μεθόδους.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

A.AUSLENDER(1976) [1]

Optimisation: methodes numeriques.

Masson,Paris.

M.A.BOUGHAZI, G.DROUET D' AUBIGNY and PHAM DINH TAO(1987) [2]. Un algorithme primal dual pour le calcul du minimum d' une fonction convexe sur l' intersection de convexes et ses applications en analyse des donnees.

Rapp.Rech. No 638M,TIM3/IMAG,Grenoble.

J.CEA (1971) [3]

Optimisation: theorie et algorithmes.

Dunod,Paris.

L.COLLATZ and W.WETTERLING(1975) [4]

Optimization Problems.

Springer-verlag New York Heidelberg Berlin.

R.DYKSTRA(1981) [5]

An Isotonic Regression Algorithm.

J. of Statist.Plann. and Inference 5, pp. 355-363.

R.DYKSTRA (1983) [6]

An Algorithm for Restricted Least Squares Regression.

J.Amer.Stat.Assoc,vol 78, No 384, pp. 837-842.

C.V.EEDEN(1956) [7]

Maximum Likelihood Estimation of Ordered Probabilities.

Proc.K.ned.Akad.Wet.(A),59/Indag.Math.,18,pp. 444-455.

I.EKELAND ET R.TEMAM(1974) [8]

Analyze Convexe et Problemes Variationnels.

Dunod, Paris.

N.GASTINEL(1966) [9]

Analyze numerique lineaire.

Hermann,Paris.

P.E.GILL,W.MURRAY and M.H.WRIGHT(1981) [10]

Practical Optimization.

Academic Press Londin New York Toronto.

C.HILDRETH(1957) [11]

A Quadratic Programming Procedure.

Naval Res Logist Quart,4,pp. 79-85.

L.S.JACOBY,J.S.KOWALIK and J.T.PIZZO(1972) [12]

Iterative Methods for Nonlinear Optimization Problems.

Prentice-Hall,Inc,New Jersey.

P.JOLY (1986) [13]

Presentation de synthese des methodes de gradient conjugue.

Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol 20,4, pp.639-665.

J.B.KRUSKAL(1964) [14]

Multidimensional Scaling by Optimizing Goodness of Fit to a nonmetric Hypothesis. Psychometrica 29,pp. 1-27 and 115-129.

P.J.LAURENT(1972) [15]

Approximation et optimisation.

Hermann,Paris.

A.LENT and Y.CENSOR (1980) [16]

Extensions of Hildreth's Rowk-Action Method for Quadratic Programming.

SIAM J.Control and Optimization,vol 18,4, pp. 444-454.

M.MINOUX(1983) [17]

Programmation mathematique: theorie et algorithmes.

Dunod,Paris.

B.PCHENITCHNY et Y.DANILINE(1977) [18]

Methodes numeriques dans les problemes d' extremum.

Edition Mir.

R.T.ROCKFELLAR(1972) [19]

Convex Analysis.

Princeton University Press,Princeton.

R.N. SHEPARD (1962) [20]

The Analysis of Proximities: Multidimensional Scaling with an Unknown Distance Function,Psychometrika 27,pp. 125-140 and 219-246.

W.A. THOMPSON (1962) [21]

The Problem of Negative Estimates of Variance Components.

Ann. Math.Statist. 33,pp. 273-289.

CHIEN-FU WU (1982) [22]

Some algorithms for Concave and Isotonic Regression.

TIMS Studies in Management Sciences, 19, pp. 105-116.

G.ZOUTENDIJK(1966) [23]

Nonlinear programming: a numerical survey.

SIAM J. on Control 4, 1, pp. 194-210.

```
C       ΙΣΟΤΟΝΙΚΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ DYKSTRA
        DIMENSION G(100) , B(100) , W(100)
        OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
        OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
        OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')
        WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΜΟΥ ΤΗΝ ΔΙΑΣΤΑΣΗ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G'
        READ(*,*) N
C       WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΜΟΥ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G ΜΕ ΤΑ '
C       WRITE(*,*)' ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
        DO 10 I=1,N
        READ(5,*) G(I)
        READ(6,*) W(I)
 10     CONTINUE


        N1=N-1
        DO 25 N2=1,1000000
        DO 20 I=1,N1
        K=1
        IF(G(I).GT.G(I+1)) THEN
        B(I)=(G(I)*W(I)+G(I+1)*W(I+1))/(W(I)+W(I+1))
        G(I)=B(I)
        G(I+1)=B(I)
        K=2
        ELSE
        GO TO 20
        ENDIF
        IF(K.EQ.1) THEN
        IF(I.EQ.N1) THEN
        GO TO 30
        ENDIF
        ENDIF
        GO TO 25
 20     CONTINUE
 25     CONTINUE



 30     WRITE(*,*)' ΤΟ ΒΕΛΤΙΣΤΟ ΔΙΑΝΥΣΜΑ G ΕΧΕΙ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ'
        DO 40 I=1,N
        WRITE(*,*) G(I)
        WRITE(8,*) G(I)
 40     CONTINUE
        WRITE(*,*) N2

        CLOSE(5)
        CLOSE(6)
        CLOSE(8)

        STOP
        END
```

```
      C      ΙΣΟΤΟΝΙΚΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ ΜΕΡΙΚΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΜΕ DYKSTRA
      DIMENSION  A(100,100) , G(100) , W(100) ,B(100) , D(100)
      WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΤΩΝ ΣΥΝΙΣΤΩΣΩΝ ΤΟΥ G'
      READ(*,*) N
      WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G ΚΑΙ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
      DO 10 I=1,N
      READ(*,*) G(I) , W(I)
 10   CONTINUE
      WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΤΩΝ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΩΝ'
      READ(*,*)  N1
      WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΤΗ ΣΥΝΙΣΤΩΣΑ Α ΜΕ ΤΗΝ ΟΠΟΙΑ ΜΕΤΕΧΕΙ Η '
      WRITE(*,*)' ΣΥΝΙΣΤΩΣΑ Χ ΣΤΟΥΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ'
      WRITE(*,*)' ΤΟ Α ΝΑ ΔΩΘΕΙ ΚΑΤΑ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟ'
      DO 25 I3=1,N1
      DO 20 I2=1,N
      READ(*,*) A(I3,I2)
 20   CONTINUE
 25   CONTINUE

      DO 70 I5=1,N1
        DO 60 K4=1,20
          DO 50 I6=1,N
              S=0
              S1=0
              DO 30 I7=1,N
              S=S+A(I5,I7)*G(I7)
 30           CONTINUE
              DO 40 I8=1,N
              P=A(I5,I8)**2
              P1=P/W(I8)
              S1=S1+P1
 40           CONTINUE
          IF(S.GT.0) THEN
          DO 55 I11=1,N
          P2=S*A(I5,I11)
          P3=P2/W(I11)
          P4=P3/S1
          G(I11)=G(I11)-P4
 55       CONTINUE
          ELSE
          GO TO 50
          ENDIF
          IF(I5.EQ.N1)THEN
          IF(I6.EQ.N)THEN
          GO TO 100
          ELSE
          ENDIF
          ENDIF
          GO TO 60
 50       CONTINUE
 60     CONTINUE
 70   CONTINUE
```

```
100   WRITE(*,*)' ΤΟ ΒΕΛΤΙΣΤΟ G ΕΧΕΙ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ '
      DO 80 I10=1,N
      WRITE(*,*) G(I10)
80    CONTINUE

      STOP
      END
```

```
      C      ΚΟΙΛΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ DYKSTRA
      DIMENSION G(100) , W(100) , Y(100)
      OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
      OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
      OPEN(7,FILE='ARXEIOY')
      OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')



      WRITE(*,*) 'ΔΩΣΕ ΜΟΥ ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΤΩΝ ΣΥΝΙΣΤΩΣΩΝ ΤΟΥ G'
      READ(*,*) N
C     WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΜΟΥ ΤΗΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G '
      DO 10 I=1,N
      READ(5,*) G(I)
C      READ(*,*) G(I)
 10   CONTINUE
C     WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΑ ΒΑΡΗ W'
      DO 11 I=1,N
      READ(6,*) W(I)
C      READ(*,*) W(I)
 11   CONTINUE
C     WRITE(*,*)' ΔΩΣΕ ΜΟΥ ΤΙΣ ΤΕΤΜΗΜΕΝΕΣ ΜΕ ΑΥΞΟΥΣΑ ΣΕΙΡΑ'
      DO 20 I1=1,N
      READ(7,*) Y(I1)
C      READ(*,*) Y(I1)
 20   CONTINUE


      DO 90 KARO=1,50000
      DO 30 J=1,N-2
      B1=(G(J+2)-G(J+1))/(Y(J+2)-Y(J+1))
      B2=(G(J+1)-G(J))/(Y(J+1)-Y(J))
      IF(B1.GT.B2) THEN
             S=0
             S1=0
             S2=0
             Q1=0
             Q2=0
             DO 40 J1=1,3
             S=S+G(J-1+J1)*W(J-1+J1)
             S1=S1+W(J-1+J1)
             S2=S2+Y(J-1+J1)*W(J-1+J1)
 40          CONTINUE
             X=S/S1
             U=S2/S1
             DO 50 J2=1,3
             Q1=Q1+(G(J-1+J2)-X)*Y(J-1+J2)*W(J-1+J2)
             Q2=Q2+((Y(J-1+J2)-U)**2)*W(J-1+J2)
 50          CONTINUE
             B=Q1/Q2
             DO 60 J3=1,3
             G(J-1+J3)=X+B*(Y(J-1+J3)-U)
 60          CONTINUE
             GO TO 90
      ELSE
```

```
      IF(J.EQ.N-2) THEN
      GO TO 100
      ENDIF
      ENDIF
30    CONTINUE
90    CONTINUE


100   WRITE(*,*)'ΟΙ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ ΒΕΛΤΙΣΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G ΕΙΝΑΙ'
      DO 110 J10=1,N
      WRITE(*,*) G(J10)
      WRITE(8,*) G(J10)
110   CONTINUE
      CLOSE(5)
      CLOSE(6)
      CLOSE(7)
      CLOSE(8)


      STOP
      END
```

```
      $LARGE
C     ΙΣΟΤΟΝΙΚΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ ΣΥΖΥΓΕΣ ΔΙΑΦΟΡΙΚΟ
      DIMENSION W1(50),P(50,50),G(50),d(1300,50),b(1300),S(1300)
      REAL Z3(1300) ,S1(1300),W(50,50),U(50),T(50),X(50),T3(1300)
      INTEGER A(50,50),K1(1300),K2(1300)
      REAL T1(1300)
      OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
      OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
      OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')

      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΗ ΔΙΑΣΤΑΣΗ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G'
      READ(*,*) N
C     WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G ΜΕ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
      DO 10 I=1,N
      READ(5,*) G(I)
      READ(6,*) W1(I)
 10   CONTINUE

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A

      DO 20 I1=2,N-1
       DO  30 J1=1,N
       IF(I1.EQ.J1)THEN
       A(I1,J1)=1
       A(I1-1,J1)=-1
       ELSE
       A(I1,J1)=0
       ENDIF
 30    CONTINUE
 20   CONTINUE

      DO 32 I1A=3,N
      A(1,I1A)=0
 32   CONTINUE
      A(1,1)=1
      A(1,2)=-1
      A(N-1,N)=-1


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ W

      DO 50 I2=1,N
         DO 40 J2=1,N
         IF(I2.EQ.J2)THEN
         W(I2,J2)=W1(I1)
         ELSE
         W(I2,J2)=0
         ENDIF
 40      CONTINUE
 50   CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A*W**-1*AT

      DO 55 II=1,N-1
```

```
      DO 55 JJ=1,N-1
      P(II,JJ)=0
 55   CONTINUE

      DO 70 I3=2,N-2
         DO 60 J3=1,N-1
         IF(I3.EQ.J3-1)THEN
         R1=1/W1(I3)
         R2=1/W1(I3+1)
         P(I3,J3-2)=P(I3,J3-2)-R1
         P(I3,J3-1)=P(I3,J3-1)+R1+R2
         P(I3,J3)=P(I3,J3)-R2
         ELSE
         ENDIF
 60      CONTINUE
 70   CONTINUE

      P(1,1)=(1/W1(1))+(1/W1(2))
      P(1,2)=-1/W1(2)
      DO 75 J4=3,N-1
      P(1,J4)=0
 75   CONTINUE

      P(N-1,N-2)=-1/W1(N-1)
      P(N-1,N-1)=(1/W1(N-1))+(1/W1(N))
      DO 77 I4=1,N-3
      P(N-1,I4)=0
 77   CONTINUE


C     ΑΡΧΙΚΗ ΣΥΝΘΗΚΗ

      DO 80 I5=1,N-1
      U(I5)=1
 80   CONTINUE

C     ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΣΥΝΟΛΟΥ J

 90   DO 100 J5=1,N-1
      IF(ABS(U(J5)).LT.0.0000001)THEN
      K1(J5)=J5
      ELSE
      K1(J5)=0
      ENDIF
 100  CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ  ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ ΓΙΑ ΤΟ ΒΗΜΑ 1

      DO 120 I6=2,N-2
       DO 110 J5=1,N-1
```

```
      IF(P(I6,J5).NE.0)THEN
      Q=(G(I6+1)/W1(I6+1))-G(I6)/W1(I6)
      T(I6)=P(I6,J5)*U(I6-1)+P(I6,J5+1)*U(I6)+P(I6,J5+2)*U(I6+1)+Q
      GO TO 120
      ELSE
      ENDIF
 110  CONTINUE
 120  CONTINUE
      Q1=(G(2)/W1(2))-G(1)/W1(1)
      Q2=(G(N)/W1(N))-G(N-1)/W1(N-1)
      T(1)=((1/W1(1))+1/W1(2))*U(1)+(-1/W1(2))*U(2)+Q1
      T(N-1)=(-1/W1(N-1))*U(N-2)+((1/W1(N-1))+1/W1(N))*U(N-1)+Q2

C     ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΗΔΕΝΙΣΜΟΥ ΤΩΝ ΣΥΝΙΣΤΩΣΩΝ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΤΕΡΜΑΤΙΣΜΟΥ
C     ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ ΤΟΥ J
 5    DO 111 L5=1,N-1
      IF(K1(L5).EQ.0)THEN
        IF(ABS(T(L5)).GT.0.000001) THEN
        GO TO 128
        ELSE
        ENDIF
      ENDIF
 111  CONTINUE


 121  DO 122 I15=1,N-1
      IF(K1(I15).GT.0)THEN
      IF(T(I15).LT.0)THEN
      K1(I15)=0
      ELSE
      ENDIF
      ENDIF
 122  CONTINUE


      DO 112 I31=1,N-1
      IF(K1(I31).EQ.0)THEN
      IF(ABS(T(I31)).GT.0.000001)THEN
      GO TO 128
      ELSE
      ENDIF
      ENDIF
      IF(K1(I31).GT.0)THEN
      IF(T(I31).LT.0)THEN
      GO TO 128
      ENDIF
      ENDIF
 112  CONTINUE

      GO TO 1010

C                          ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ


 128      DO 1000 L=1,1300
```

```
C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ

        IF(L.EQ.1)THEN
        GO TO 136
        ENDIF

        DO 127 K9=2,N-2
           DO 126 M=1,N-1
           IF(P(K9,M).NE.0)THEN
           Q=(G(K9+1)/W1(K9+1))-G(K9)/W1(K9)
           T(K9)=P(K9,M)*U(K9-1)+P(K9,M+1)*U(K9)+P(K9,M+2)*U(K9+1)+Q
           GO TO 127
           ELSE
           ENDIF
 126       CONTINUE
 127    CONTINUE
        Q1=(G(2)/W1(2))-G(1)/W1(1)
        Q2=(G(N)/W1(N))-G(N-1)/W1(N-1)
        T(1)=((1/W1(1))+1/W1(2))*U(1)+(-1/W1(2))*U(2)+Q1
        T(N-1)=(-1/W1(N-1))*U(N-2)+((1/W1(N-1))+1/W1(N))*U(N-1)+Q2


C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ B(K-1)

 136    AS=0
        DO 140 J7=1,N-1
        AS=AS+T(J7)**2
 140    CONTINUE
        S(L)=AS
        IF(L.EQ.1)THEN
        B(L)=0
        ELSE
        B(L)=S(L)/S(L-1)
        ENDIF

C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ D(K)


        IF(L.EQ.1)THEN
        DO 142 II7=1,N-1
        D(1,II7)=-T(II7)
 142    CONTINUE
        GO TO 148
        ELSE
        ENDIF


        DO 145 I7=1,N-1
        D(L,I7)=-T(I7)+B(L)*D(L-1,I7)
 145    CONTINUE

C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ Λ(K)
```

```
 148  DO 160 I8=1,N-1
      S2=0
         DO 150 J8=1,N-1
         S2=S2+P(I8,J8)*D(L,J8)
 150     CONTINUE
      S1(I8)=S2
 160  CONTINUE


      S3=0
      S4=0
      DO 170 I9=1,N-1
      S3=S3+T(I9)*D(L,I9)
      S4=S4+S1(I9)*D(L,I9)
 170  CONTINUE
      Z1=-S3/S4

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ Λ*

      VIN=80000000
      DO 180 J9=1,N-1
      IF(K1(J9).EQ.0)THEN
        IF(D(L,J9).LT.0)THEN
        Z3(J9)=-U(J9)/D(L,J9)
        ELSE
      ENDIF
      ENDIF
      IF(Z3(J9).LT.VIN)THEN
      H=VIN
      VIN=Z3(J9)
      Z3(J9)=H
      ELSE
      ENDIF
 180  CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ U(I)

 181  IF(Z1.LT.VIN)THEN
      DO 190 I10=1,N-1
        IF(K1(I10).EQ.0)THEN
        U(I10)=U(I10)+Z1*D(L,I10)
        ELSE
        U(I10)=0
        ENDIF
 190  CONTINUE
      ELSE
      DO 200 J10=1,N-1
         IF(K1(J10).EQ.0)THEN
         U(J10)=U(J10)+VIN*D(L,J10)
         ELSE
         U(J10)=0
         ENDIF
 200  CONTINUE
```

```
      WRITE(*,*)'**********************'
      GO TO 90
      ENDIF
      WRITE(*,*) L
      WRITE(*,*)'******************'

C     ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΙΘΑΝΟΥ ΕΛΑΧΙΣΤΟΥ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΣ

      IF(L.GE.2)THEN
      DO 220 M9=2,N-2
       DO 230 M10=1,N-1
       IF(P(M9,M10).NE.0)THEN
       Q3=((G(M9+1)/W1(M9+1))-G(M9)/W1(M9))*U(M9)
       Q4=P(M9,M10)*U(M9-1)*U(M9)
       Q5=P(M9,M10+1)*U(M9)**2
       Q6=P(M9,M10+2)*U(M9)*U(M9+1)
       T1(M9)=0.5*(Q4+Q5+Q6)+Q3
       GO TO 220
       ENDIF
 230   CONTINUE
 220  CONTINUE
      Q7=((G(2)/W1(2))-G(1)/W1(1))*U(1)
      T1(1)=0.5*(P(1,1)*U(1)**2+P(1,2)*U(1)*U(2))+Q7
      Q8=((G(N)/W1(N))-G(N-1)/W1(N-1))*U(N-1)
      T1(N-1)=0.5*(P(N-2,N-1)*U(N-2)+P(N-1,N-1)*U(N-1)**2)+Q8

      T2=0
      DO 240 M11=1,N-1
      T2=T2+T1(M11)
 240  CONTINUE
      T3(L)=T2

      IF(T3(L).GE.T3(L-1))THEN
      GO TO 90
      ELSE
      ENDIF
      ENDIF

 1000 CONTINUE


C     ΕΚΤΥΠΩΣΗ ΤΟΥ X

 1010 DO 1020 N1=2,N-1
      X(N1)=(G(N1)+U(N1-1)-U(N1))/W1(N1)
 1020 CONTINUE
      X(1)=(G(1)-U(1))/W1(1)
      X(N)=(G(N)+U(N-1))/W1(N)

      WRITE(*,*)'***************'

      DO 1030 N2=1,N
      WRITE(*,*) X(N2)
      WRITE(8,*) X(N2)
 1030 CONTINUE
```

```
CLOSE(5)
CLOSE(6)
CLOSE(8)

STOP
```

```
$LARGE                        C      ΚΟΙΛΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ ΣΥΖΥΓΕΣ ΔΙΑΦΟΡΙΚΟ

      DIMENSION W1(50),P(50,50),G(50),d(1300,50),b(1500),S(1500)
      REAL Z3(1500),S1(1500),W(50,50),U(50),T(1500),X(50),T3(1500)
      REAL A6(50),A7(50),A8(50,50),A9(50),A10(50),T1(1500)
      REAL Y(50),A(50,50),A1(50,50),A2(50,50),A3(50,50),A4(50),A5(50)
      INTEGER K1(1500),K2(1500)
      OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
      OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
      OPEN(7,FILE='ARXEIOY')
      OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')

      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΗ ΔΙΑΣΤΑΣΗ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G'
      READ(*,*) N
      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G ΜΕ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
      DO 10 I=1,N
      READ(5,*) G(I)
      READ(6,*) W1(I)
 10   CONTINUE
      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ Y'
      DO 11 I=1,N
      READ(7,*) Y(I)
 11   CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΠΙΝΑΚΑ W

      DO 50 I2=1,N
         DO 40 J2=1,N
         IF(I2.EQ.J2)THEN
         W(I2,J2)=1/W1(I2)
         ELSE
         W(I2,J2)=0
         ENDIF
 40      CONTINUE
 50   CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A

      DO 55 II=1,N-2
      DO 55 JJ=1,N
      A(II,JJ)=0
 55   CONTINUE

      DO 70 I3=1,N-2
         DO 60 J3=1,N
         IF(I3.EQ.J3)THEN
         A(I3,J3)=Y(I3+2)-Y(I3+1)
         A(I3,J3+1)=-(Y(I3+2)-Y(I3))
         A(I3,J3+2)=Y(I3+1)-Y(I3)
         ELSE
         ENDIF
```

```
 60        CONTINUE
 70     CONTINUE

C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΣΤΡΟΦΟΥ ΤΟΥ Α        =Α1

        DO 65 I3=1,N
           DO 65 J3=1,N-2
           A1(I3,J3)=A(J3,I3)
 65     CONTINUE

C       ΠΟΛΛΑΠΛΑΣΙΑΣΜΟΣ ΤΟΥ Α ΜΕ ΤΟΝ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΤΟΥ W        =Α2

        DO 68 I3=1,N-2
           DO 67 J3=1,N
           A2(I3,J3)=0
              DO 66 II3=1,N
              A2(I3,J3)=A2(I3,J3)+A(I3,II3)*W(II3,J3)
 66           CONTINUE
 67        CONTINUE
 68     CONTINUE

C       ΠΟΛΛΑΠΛΑΣΙΑΣΜΟΣ ΤΟΥ Α2 ΜΕ ΤΟΝ Α1         =Α3

        DO 71 I3=1,N-2
           DO 71 J3=1,N-2
           A3(I3,J3)=0
             DO 78 II3=1,N
             A3(I3,J3)=A3(I3,J3)+A2(I3,II3)*A1(II3,J3)
 78     CONTINUE
 71     CONTINUE


C       ΑΡΧΙΚΗ ΣΥΝΘΗΚΗ

        DO 80 I5=1,N-2
        U(I5)=1
 80     CONTINUE

C       ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ


C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΣΥΝΟΛΟΥ J

 90     DO 100 J5=1,N-2
        IF(ABS(U(J5)).LT.0.000001)THEN
        K1(J5)=J5
        ELSE
        K1(J5)=0
        ENDIF
 100    CONTINUE


C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ  ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ ΓΙΑ ΤΟ ΒΗΜΑ 1

        DO 101 I=1,N-2
```

```
          A4(I)=0
          DO 104 J=1,N-2
          A4(I)=A4(I)+A3(I,J)*U(J)
 104    CONTINUE
 101    CONTINUE

        DO 102 I=1,N-2
          A5(I)=0
          DO 108 J=1,N
          A5(I)=A5(I)+A2(I,J)*G(J)
 108    CONTINUE
 102    CONTINUE

        DO 103 I=1,N-2
        T(I)=A4(I)-A5(I)
 103    CONTINUE


C       ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΗΔΕΝΙΣΜΟΥ ΤΩΝ ΣΥΝΙΣΤΩΣΩΝ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΤΕΡΜΑΤΙΣΜΟΥ
C       ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ ΤΟΥ J
 5      DO 111 L5=1,N-2
        IF(K1(L5).EQ.0)THEN
          IF(ABS(T(L5)).GT.0.000001) THEN
          GO TO 128
          ELSE
          ENDIF
        ENDIF
 111    CONTINUE


 121    DO 122 I15=1,N-2
        IF(K1(I15).GT.0)THEN
        IF(T(I15).LT.0)THEN
        K1(I15)=0
        GO TO 128
        ELSE
        ENDIF
        ENDIF
 122    CONTINUE



        GO TO 1010

C                          ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ


 128        DO 1000 L=1,1300


C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ

        IF(L.EQ.1)THEN
        GO TO 136
        ENDIF
```

```
      DO 113 I=1,N-2
         A4(I)=0
         DO 118 J=1,N-2
         A4(I)=A4(I)+A3(I,J)*U(J)
 118  CONTINUE
 113  CONTINUE

      DO 114 I=1,N-2
         A5(I)=0
         DO 119 J=1,N
         A5(I)=A5(I)+A2(I,J)*G(J)
 119  CONTINUE
 114  CONTINUE

      DO 116 I=1,N-2
      T(I)=A4(I)-A5(I)
 116  CONTINUE

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ B(K-1)

 136  AS=0
      DO 140 J7=1,N-2
      AS=AS+T(J7)**2
 140  CONTINUE
      S(L)=AS
      IF(L.EQ.1)THEN
      B(L)=0
      ELSE
      B(L)=S(L)/S(L-1)
      ENDIF

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ D(K)


      IF(L.EQ.1)THEN
      DO 142 II7=1,N-2
      D(1,II7)=-T(II7)
 142  CONTINUE
      GO TO 148
      ELSE
      ENDIF


      DO 145 I7=1,N-2
      D(L,I7)=-T(I7)+B(L)*D(L-1,I7)
 145  CONTINUE

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ Λ(K)

 148  DO 160 I8=1,N-2
      S2=0
         DO 150 J8=1,N-2
         S2=S2+A3(I8,J8)*D(L,J8)
 150     CONTINUE
```

```
      S1(I8)=S2
 160  CONTINUE


      S3=0
      S4=0
      DO 170 I9=1,N-2
      S3=S3+T(I9)*D(L,I9)
      S4=S4+S1(I9)*D(L,I9)
 170  CONTINUE
      Z1=-S3/S4

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ Λ*

      VIN=80000000
      DO 180 J9=1,N-2
      IF(K1(J9).EQ.0)THEN
        IF(D(L,J9).LT.0)THEN
        Z3(J9)=-U(J9)/D(L,J9)
        ELSE
      ENDIF
      ENDIF
      IF(Z3(J9).LT.VIN)THEN
      H=VIN
      VIN=Z3(J9)
      Z3(J9)=H
      ELSE
      ENDIF
 180  CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ U(I)

 181  IF(Z1.LT.VIN)THEN
      Z7=Z1
      DO 190 I10=1,N-2
        IF(K1(I10).EQ.0)THEN
        U(I10)=U(I10)+Z7*D(L,I10)
        ELSE
        U(I10)=0
        ENDIF
 190  CONTINUE
      ELSE
      Z7=VIN
      DO 200 J10=1,N-2
         IF(K1(J10).EQ.0)THEN
         U(J10)=U(J10)+Z7*D(L,J10)
         ELSE
         U(J10)=0
         ENDIF
 200  CONTINUE

      WRITE(*,*)'*********************'
      GO TO 90
      ENDIF
```

```
      WRITE(*,*) L
      WRITE(*,*)'******************'

C     ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΙΘΑΝΟΥ ΕΛΑΧΙΣΤΟΥ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΣ
      IF(L.GE.2)THEN
      DO 215 I=1,N-2
         A4(I)=0
         DO 216 J=1,N-2
         A4(I)=A4(I)+A3(I,J)*U(J)
 216  CONTINUE
 215  CONTINUE

      DO 220 I=1,N-2
         A5(I)=0
         DO 221 J=1,N
         A5(I)=A5(I)+A2(I,J)*G(J)
 221  CONTINUE
 220  CONTINUE

      DA=0
      DO 225 I=1,N-2
      DA=DA+U(I)*A4(I)
 225  CONTINUE

      DAN=0
      DO 230 J=1,N-2
      DAN=DAN+U(J)*(-A5(J))
 230  CONTINUE


      T3(L)=0.5*DA+DAN

      IF(T3(L).GE.T3(L-1))THEN
      DO 231 I=1,N-2
      IF(K1(I).EQ.0)THEN
      U(I)=U(I)-Z7*D(L,I)
      ELSE
      U(I)=0
      ENDIF
 231  CONTINUE
      GO TO 90
      ELSE
      ENDIF
      ENDIF

 1000 CONTINUE


C     ΕΚΤΥΠΩΣΗ ΤΟΥ X

 1010 DO 1015 I=1,N
         DO 1015 J=1,N-2
         A8(I,J)=0
         DO 1017 II=1,N
         A8(I,J)=A8(I,J)+W(I,II)*A1(II,J)
```

```
             1017 CONTINUE
 1015 CONTINUE

      DO 1020 I=1,N
         A9(I)=0
         DO 1023 J=1,N-2
         A9(I)=A9(I)+A8(I,J)*U(J)
 1023 CONTINUE
 1020 CONTINUE

      DO 1025 I=1,N
         A10(I)=0
         DO 1027 J=1,N
         A10(I)=A10(I)+W(I,J)*G(J)
 1027 CONTINUE
 1025 CONTINUE

      DO 1026 I=1,N
      X(I)=A10(I)-A9(I)
 1026 CONTINUE

      DO 1030 N2=1,N
      WRITE(*,*) X(N2)
      WRITE(8,*) X(N2)

 1030 CONTINUE

      CLOSE(5)
      CLOSE(6)
      CLOSE(7)
      CLOSE(8)
      STOP
      END
```

```
C      ΙΣΟΤΟΝΙΚΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ ΒΕΛΤΙΩΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟ ΥΠΟΔΙΑΦΟΡΙΚΟΥ
$LARGE

      DIMENSION W1(50),P(30,30),G(50),D(3500,20),S(3500)
      REAL Z3(3500) ,S1(3500),W(30,30),U(50),T(3500),X(50),T3(3500)
      INTEGER A(30,30),K1(3500),K2(3500)
      REAL T1(3500) , T4(3500)  , U1(50) , B(3500) , X1(50)
      OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
      OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
      OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')

      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΗ ΔΙΑΣΤΑΣΗ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G'
      READ(*,*) N
C     WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G ΜΕ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
      DO 10 I=1,N
      READ(5,*) G(I)
      READ(6,*) W1(I)
 10   CONTINUE

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A

      DO 20 I1=2,N-1
       DO  30 J1=1,N
       IF(I1.EQ.J1)THEN
       A(I1,J1)=1
       A(I1-1,J1)=-1
       ELSE
       A(I1,J1)=0
       ENDIF
 30    CONTINUE
 20   CONTINUE

      DO 32 I1A=3,N
      A(1,I1A)=0
 32   CONTINUE
      A(1,1)=1
      A(1,2)=-1
      A(N-1,N)=-1


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ W

      DO 50 I2=1,N
         DO 40 J2=1,N
         IF(I2.EQ.J2)THEN
         W(I2,J2)=W1(I1)
         ELSE
         W(I2,J2)=0
         ENDIF
 40      CONTINUE
 50   CONTINUE


C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A*W**-1*AT
```

```
      DO 55 II=1,N-1
      DO 55 JJ=1,N-1
      P(II,JJ)=0
 55   CONTINUE

      DO 70 I3=2,N-2
         DO 60 J3=1,N-1
         IF(I3.EQ.J3-1)THEN
         R1=1/W1(I3)
         R2=1/W1(I3+1)
         P(I3,J3-2)=P(I3,J3-2)-R1
         P(I3,J3-1)=P(I3,J3-1)+R1+R2
         P(I3,J3)=P(I3,J3)-R2
         ELSE
         ENDIF
 60      CONTINUE
 70   CONTINUE

      P(1,1)=(1/W1(1))+(1/W1(2))
      P(1,2)=-1/W1(2)
      DO 75 J4=3,N-1
      P(1,J4)=0
 75   CONTINUE

      P(N-1,N-2)=-1/W1(N-1)
      P(N-1,N-1)=(1/W1(N-1))+(1/W1(N))
      DO 77 I4=1,N-3
      P(N-1,I4)=0
 77   CONTINUE


C     ΑΡΧΙΚΗ ΣΥΝΘΗΚΗ

      DO 80 I5=1,N-1
      U(I5)=0
 80   CONTINUE
      N30=1
      T4(1)=-100000
C                     ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ
C                     ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ


          DO 1000 L=1,3000

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ

       DO 127 K9=2,N-2
         DO 126 M=1,N-1
         IF(P(K9,M).NE.0)THEN
         Q=(G(K9+1)/W1(K9+1))-G(K9)/W1(K9)
         T(K9)=-(P(K9,M)*U(K9-1)+P(K9,M+1)*U(K9)+P(K9,M+2)*U(K9+1)+Q)
         GO TO 127
         ELSE
         ENDIF
```

```
 126        CONTINUE
 127    CONTINUE
        Q1=(G(2)/W1(2))-G(1)/W1(1)
        Q2=(G(N)/W1(N))-G(N-1)/W1(N-1)
        T(1)=-(((1/W1(1))+1/W1(2))*U(1)+(-1/W1(2))*U(2)+Q1)
        T(N-1)=-((-1/W1(N-1))*U(N-2)+((1/W1(N-1))+1/W1(N))*U(N-1)+Q2)

C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ D ΣΤΟ ΒΗΜΑ 1
        IF(L.EQ.1)THEN
        DO 135 I=1,N-1
        D(1,I)=T(I)
 135    CONTINUE
        GO TO 150
        ELSE
        ENDIF

C       ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ B(K)


        DO 141 J7=1,N-1
        SUM=D(L-1,J7)*T(J7)
        IF(SUM.LT.0)THEN
        B(J7)=(-1.5*SUM)/S(L-1)
        ELSE
        B(J7)=0
        ENDIF
 141    CONTINUE


C       ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΟΥ D
        DO 145 I7=1,N-1
        D(L,I7)=T(I7)+B(I7)*D(L-1,I7)
 145    CONTINUE

C       ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΜΕΤΡΟΥ ΣΤΟ ΤΕΤΡΑΓΩΝΟ ΤΟΥ D

 150    SA=0
        DO 151 J=1,N-1
        SA=SA+D(L,J)**2
 151    CONTINUE
        S(L)=SA

C       ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΙΘΑΝΟΥ ΜΕΓΙΣΤΟΥ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΣ

 152    DO 220 M9=2,N-2
         DO 230 M10=1,N-1
         IF(P(M9,M10).NE.0)THEN
         Q3=((G(M9+1)/W1(M9+1))-G(M9)/W1(M9))*U(M9)
         Q4=P(M9,M10)*U(M9-1)*U(M9)
         Q5=P(M9,M10+1)*U(M9)**2
         Q6=P(M9,M10+2)*U(M9)*U(M9+1)
         T1(M9)=0.5*(Q4+Q5+Q6)+Q3
         GO TO 220
         ENDIF
 230     CONTINUE
```

```
  220  CONTINUE
       Q7=((G(2)/W1(2))-G(1)/W1(1))*U(1)
       T1(1)=0.5*(P(1,1)*U(1)**2+P(1,2)*U(1)*U(2))+Q7
       Q8=((G(N)/W1(N))-G(N-1)/W1(N-1))*U(N-1)
       T1(N-1)=0.5*(P(N-2,N-1)*U(N-2)+P(N-1,N-1)*U(N-1)**2)+Q8

       T2=0
       DO 240 M11=1,N-1
       T2=T2+T1(M11)
  240  CONTINUE
       T3(L)=-T2


       IF(T3(L).GE.T4(N30))THEN
       N30=N30+1
       T4(N30)=T3(L)
       F15=L+1
       T10=1/F15
       GO TO 251
       ELSE
       ENDIF

C      ΤΕΡΜΑΤΙΣΜΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ

       IF(ABS(T4(N30)-T3(L)).LT.0.0000001)THEN
       GO TO 1010
       ENDIF

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΚ
       T10=(T4(N30)-T3(L))/S(L)

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ U(K+1)

  251  DO 250 I10=1,N-1
       U(I10)=U(I10)+T10*D(L,I10)
  250  CONTINUE
       WRITE(*,*)'***************'

 1000  CONTINUE


C      ΕΚΤΥΠΩΣΗ ΤΟΥ Χ

 1010  DO 1020 N1=2,N-1
       X(N1)=(G(N1)+U(N1-1)-U(N1))/W1(N1)
 1020  CONTINUE
       X(1)=(G(1)-U(1))/W1(1)
       X(N)=(G(N)+U(N-1))/W1(N)


       WRITE(*,*)'***************'

       DO 1030 N2=1,N
       WRITE(*,*) X(N2)
       WRITE(8,*) X(N2)
```

```
1030 CONTINUE

     CLOSE(5)
     CLOSE(6)
     CLOSE(8)

     STOP
     END
```

```
                C     ΚΟΙΛΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕ ΤΗΝ ΒΕΛΤΙΩΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟ ΥΠΟΔΙΑΦΟ
ΟΥ
 $LARGE
       DIMENSION P(50,50),G(50),d(3000,15),S(4000),Y(60),A4(4000)
       REAL Z3(4000),S1(4000),W(50,50),U(50),T(4000),X(50),T3(4000)
       INTEGER K1(4000),K2(4000)
       REAL T1(4000),U1(50),B(4000),A5(4000),A8(20,20)
       REAL A1(60,60),A2(60,60),A3(60,60),W1(50),A9(20),A10(20)
       REAL A(50,50)
       OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
       OPEN(6,FILE='ARXEIOW')
       OPEN(7,FILE='ARXEIOY')
       OPEN(8,FILE='ARXEIOX',STATUS='NEW')

       WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΗ ΔΙΑΣΤΑΣΗ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ G'
       READ(*,*) N
C      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ G ΜΕ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ W'
       DO 10 I=1,N
       READ(5,*) G(I)
       READ(6,*) W1(I)

 10    CONTINUE
C      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΙΣ ΣΥΝΙΣΤΩΣΕΣ ΤΟΥ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ Y'
       DO 11 I=1,N
       READ(7,*) Y(I)
 11    CONTINUE


C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΥ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ W

       DO 50 I2=1,N
          DO 40 J2=1,N
          IF(I2.EQ.J2)THEN
          W(I2,J2)=1/W1(I2)
          ELSE
          W(I2,J2)=0
          ENDIF
 40       CONTINUE
 50    CONTINUE

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ Α


       DO 55 II=1,N-2
       DO 55 JJ=1,N
       A(II,JJ)=0
 55    CONTINUE

       DO 70 I3=1,N-2
          DO 60 J3=1,N
          IF(I3.EQ.J3)THEN
          A(I3,J3)=Y(I3+2)-Y(I3+1)
          A(I3,J3+1)=-(Y(I3+2)-Y(I3))
          A(I3,J3+2)=Y(I3+1)-Y(I3)
          ENDIF
 60       CONTINUE
```

```
 70    CONTINUE


C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΣΤΡΟΦΟΥ ΤΟΥ A = A1
       DO 65 I3=1,N
          DO 65 J3=1,N-2
          A1(I3,J3)=A(J3,I3)
 65    CONTINUE

C      ΠΟΛΛΑΠΛΑΣΙΑΣΜΟΣ ΤΟΥ A ΜΕ ΤΟΝ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟ ΤΟΥ W = A2
       DO 68 I3=1,N-2
          DO 67 J3=1,N
          A2(I3,J3)=0
            DO 66 II3=1,N
            A2(I3,J3)=A2(I3,J3)+A(I3,II3)*W(II3,J3)
 66         CONTINUE
 67       CONTINUE
 68    CONTINUE

C      ΠΟΛΛΑΠΛΑΣΙΑΣΜΟΣ ΤΟΥ A2 ΜΕ ΤΟΝ A1 = A3

       DO 71 I3=1,N-2
          DO 71 J3=1,N-2
          A3(I3,J3)=0
            DO 71 II3=1,N
            A3(I3,J3)=A3(I3,J3)+A2(I3,II3)*A1(II3,J3)
 71    CONTINUE


C      ΑΡΧΙΚΗ ΣΥΝΘΗΚΗ

       DO 80 I5=1,N-2
       U(I5)=0
 80    CONTINUE
       N30=1
       S5=-100000
C                        ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ
C                        ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ

            DO 1000 L=1,3000

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΑΝΑΔΕΛΤΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΟΣ

       DO 90 I=1,N-2
       A4(I)=0
       DO 113 J=1,N-2
       A4(I)=A4(I)+A3(I,J)*U(J)
 113   CONTINUE
 90    CONTINUE

       DO 91 I=1,N-2
       A5(I)=0
       DO 114 J=1,N
       A5(I)=A5(I)+A2(I,J)*G(J)
```

```
 114   CONTINUE
  91   CONTINUE

       DO 116 I=1,N-2
       T(I)=A5(I)-A4(I)
C       WRITE(*,*) T(I)
 116   CONTINUE

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ D ΣΤΟ ΒΗΜΑ 1
       IF(L.EQ.1)THEN
       DO 135 I=1,N-2
       D(1,I)=T(I)
 135   CONTINUE
       GO TO 150
       ELSE
       ENDIF

C      ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ B(K)

       DO 141 J7=1,N-2
       SUM=D(L-1,J7)*T(J7)
       IF(SUM.LT.0)THEN
       B(J7)=(-1.5*SUM)/S(L-1)
       ELSE
       B(J7)=0
       ENDIF
 141   CONTINUE


C      ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΟΥ D
       DO 145 I7=1,N-2
       D(L,I7)=T(I7)+B(I7)*D(L-1,I7)
 145   CONTINUE

C      ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΜΕΤΡΟΥ ΣΤΟ ΤΕΤΡΑΓΩΝΟ ΤΟΥ D

 150   SA=0
       DO 151 J=1,N-2
       SA=SA+D(L,J)**2
 151   CONTINUE
       S(L)=SA

C      ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΙΘΑΝΟΥ ΜΕΓΙΣΤΟΥ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΙΣΕΩΣ

 152    DA=0
        DO 225 I=1,N-2
        DA=DA+U(I)*A4(I)
 225    CONTINUE

        DAN=0
        DO 230 J=1,N-2
        DAN=DAN+U(J)*(-A5(J))
 230    CONTINUE

        T3(L)=-(0.5*DA+DAN)
```

```
      IF(T3(L).GE.S5)THEN
      N30=N30+1
      H5=S5
      S5=T3(L)
      T3(L)=H5
      F15=L+1
      T10=1/F15
      DO 241 I=1,N-1
      U1(I)=U(I)
 241  CONTINUE
      GO TO 251
      ELSE
      ENDIF

C     ΤΕΡΜΑΤΙΣΜΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ

      IF(ABS(S5-T3(L)).LT.0.001)THEN
      GO TO 1010
      ENDIF

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΚ
      T10=(S5-T3(L))/S(L)

C     ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ U(K+1)

 251  DO 250 I10=1,N-2
      U(I10)=U(I10)+T10*D(L,I10)
      WRITE(*,*) L
 250  CONTINUE
      WRITE(*,*)'***************'

 1000 CONTINUE


C     ΕΚΤΥΠΩΣΗ ΤΟΥ Χ

 1010 DO 1015 I=1,N
         DO 1015 J=1,N-2
         A8(I,J)=0
         DO 1015 II=1,N
         A8(I,J)=A8(I,J)+W(I,II)*A1(II,J)
 1015 CONTINUE

      DO 1020 I=1,N
        A9(I)=0
        DO 1020 J=1,N-2
        A9(I)=A9(I)+A8(I,J)*U1(J)
 1020 CONTINUE

      DO 1025 I=1,N
         A10(I)=0
         DO 1025 J=1,N
         A10(I)=A10(I)+W(I,J)*G(J)
 1025 CONTINUE
```

```
      DO 1026 I=1,N
      X(I)=A10(I)-A9(I)
1026  CONTINUE

      DO 1030 N2=1,N
      WRITE(*,*) X(N2)
      WRITE(8,*) X(N2)
1030  CONTINUE
      CLOSE(5)
      CLOSE(6)
      CLOSE(7)
      CLOSE(8)


      STOP
      END
```

```
                C       Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ   F
      REAL  W(60) , G(60) , X(60)
      OPEN(4,FILE='ARXEIOW')
      OPEN(5,FILE='ARXEIOG')
      OPEN(6,FILE='ARXEIOX')

      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΤΩΝ ΣΗΜΕΙΩΝ'
      READ(*,*) N
C      WRITE(*,*)'ΔΩΣΕ ΤΑ  W , G , X'
      DO 10 I=1,N
      READ(4,*) W(I)
      READ(5,*) G(I)
      READ(6,*) X(I)
 10   CONTINUE
      S=0
      DO 20 J=1,N
      S=S+W(J)*(G(J)-X(J))**2
 20   CONTINUE
      WRITE(*,*)'Η ΒΕΛΤΙΣΤΗ ΤΙΜΗ ΤΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΣ ΕΙΝΑΙ'
      WRITE(*,*) S
      CLOSE(4)
      CLOSE(5)
      CLOSE(6)
      STOP
      END
```