ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης

Προσεγγιστικές Μέθοδοι Newton (Quasi Newton-Methods)

7ο Εξάμηνο Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ
Εισαγωγικό Μάθημα

Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου
Καθηγητής ΕΜΠ

kgianna@central.ntua.gr

http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research/

Γιατί Quasi-Newton???

- Η Newton είναι πολύ πιο γρήγορη από την απότομη κάθοδο…
- Χρειάζεται όμως τον υπολογισμό του Εσσιανού Μητρώου hess(F) της F (συμμετρικό μητρώο NxN δεύτερων παραγώγων). Ακριβό!!!
- Με την Quasi-Newton προσεγγίζονται, αντί να υπολογίζονται ακριβώς οι δεύτερες παράγωγοι.
- Η προσέγγιση γίνεται με αναδρομικό τύπο, χρησιμοποιώντας την υπολογισμένη κλίση (grad F).
- Η συζυγής μέθοδος χρειάζεται για να βρίσκεται το grad(F) και από αυτό να προσεγγίζεται το hess(F).
- Η Quasi-Newton μέθοδος είναι, γενικά, γρήγορη αρκεί να μην είμαστε πολύτ μακριά από τη βέλτιστη λύση.

Κλασική μέθοδος Newton

Γενική γραφή του διανύσματος διόρθωσης των τιμών των μεταβλητών σχεδιασμού:

$$\overrightarrow{p}^n = -(B^n)^{-1}\nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$

$$F(\overrightarrow{x}^n + \overrightarrow{p}^n) \approx F(\overrightarrow{x}^n) + \overrightarrow{p}^{nT}\nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$

Επιθυμητός ο μηδενισμός του grad($F(\overrightarrow{x}^n + \overrightarrow{p}^n)$ **):**

$$\nabla F(\overrightarrow{x}^n) + \nabla^2 F(\overrightarrow{x}^n)\ \overrightarrow{p}^n = 0$$

$$\overrightarrow{p}^n = -(\nabla^2 F(\overrightarrow{x}^n))^{-1}\ \nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$

Quasi-Newton

Προσέγγιση όπως η μέθοδος της τέμνουσας:

$$\nabla^2 F(\overrightarrow{x}^{n+1})\ (\overrightarrow{x}^{n+1} - \overrightarrow{x}^{n}) \approx \nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1}) - \nabla F(\overrightarrow{x}^{n})$$

⇨ $\textit{Μέθοδος}\ SR1$ (Symmetric Rank One)

$$B^{n+1} = B^n + \frac{(\overrightarrow{y}^n - B^n \overrightarrow{s}^n)\ (\overrightarrow{y}^n - B^n \overrightarrow{s}^n)^T}{(\overrightarrow{y}^n - B^n \overrightarrow{s}^n)^T\ \overrightarrow{s}^n}$$

⇨ $\textit{Μέθοδος}\ BFGS$ (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)

$$B^{n+1} = B^n - \frac{B^n \overrightarrow{s}^n \overrightarrow{s}^{n\,T} B^n}{\overrightarrow{s}^{n\,T} B^n \overrightarrow{s}^n} + \frac{\overrightarrow{y}^n \overrightarrow{y}^{n\,T}}{\overrightarrow{y}^{n\,T} \overrightarrow{s}^n}$$

όπου

$$\overrightarrow{s}^n = \overrightarrow{x}^{n+1} - \overrightarrow{x}^n$$

$$\overrightarrow{y}^n = \nabla F(\overrightarrow{x}^{n+1}) - \nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$

<u>Βασικό:</u> ο αναδρομικός τύπος πρέπει να διατηρεί τη συμμετρικότητα του μητρώου!!!!

Quasi-Newton χωρίς αντιστροφή μητρώου

$$H^n = (B^n)^{-1}$$

$$H^{n+1} \;=\; (I - \rho^n \overrightarrow{s}^n \overrightarrow{y}^{nT}) H^n (I - \rho^n \overrightarrow{y}^n \overrightarrow{s}^{nT}) \;+\; \rho^n \overrightarrow{s}^n \overrightarrow{s}^{nT}$$

$$\rho^n \;=\; \frac{1}{\overrightarrow{y}^{nT} \overrightarrow{s}^n}$$

$$\overrightarrow{p}^n \;=\; -H^n \,\nabla F(\overrightarrow{x}^n)$$