Bir boyutlu sınırsız optimizasyon

Newton

Quasi-Newton

Secant metodu.

Tek değişkenli fonksiyonların optimizasyonu için 3 neden vardır:

1- Çoğu problemde sınırlar amaç fonksiyonu içinde tanımlanır. Böylece boyutsal olarak tek değişkenli fonksiyona dönüşür.
2- Bazı sınırsız problemler doğası gereği yalnız bir değişken içerir.
3- Sınırlı ve sınırsız optimizasyon problemlerinde genel olarak tek boyutlu araştırmalar kullanılır. (6 ve 8. Bölümlerde açıklanmıştır)

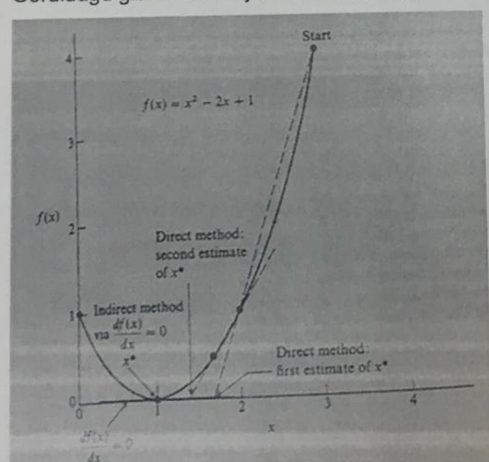
Yüksek hızlı bilgisayarlar gelişmeden önce optimizasyon yöntemleri sınırlıydı. Bu yöntemlere dolaylı yöntemler denilir. Potansiyel ekstremum noktalarının hesaplanmasını sağlar. Hesaplama yapılırken gerekli koşullar ve amaç fonksiyonunun değeri gibi analitik türevi kullanılır.

Modern bilgisayarlarla yapılan ise doğrudan yöntemlerdir. Doğrudan yöntemlerde bilgisayar, ekstremumu fonksiyon değerleriyle karşılaştırma yoluyla bulur. Sırayla deneme noktalarını; $x^{(1)}$, $x^{(2)}$ kullanarak karşılaştırır. Yani analitik türevleri kullanmaz.

Doğrudan ve dolaylı yöntemlerin farkını gösteren formüller bulunmuştur.

Örnek olarak $f(x)= x^2-2x+1$ fonksiyonunu inceleyelim.

Görüldüğü gibi bu fonksiyon tek bir x değişkenine bağlıdır.



Şekil 1. Fonksiyonun x^* değerlerini bulmak için kullanılan bir grafik

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Dolaylı yöntem için: $df(x)/dx=0$ (x'e göre türevi alınıp sıfıra eşitlenirse x bulunur.)

$d(x^2-2x+1)/dx=2x-2=0$ ..... x=1 bulunur.

$d^2(x^2-2x+1)/dx^2=2$..... yani ikinci türev sıfırdan büyük olduğundan

minimum nokta bulunmuş olur.

Hatırlatma:

$d^2f(x)/dx^2>0$..... *minimum*

$d^2f(x)/dx^2<0$..... *maksimum*

Özet olarak:

Doğrudan yöntemde varsayım yapılıyor. Önce son iki noktadan doğru geçirili x^* değeri varsayılmış oluyor. Sonra bir önceli ikili noktadan doğru geçirilerek varsayır işlemine devam ediliyor. Sonuç aynı olana kadar devam edilir.

Dolaylı yöntemde fonksiyonun değişkene göre türevi alınıp sıfıra eşitlenip bulunuyor.

Doğrudan yöntemde sayısal küçültme yapmak için sadece am fonksiyonunun değerleri kullanılabilir.

Bir başlangıç değeriyle başlarsak ve buna x dersek

$x^0=0$ diyelim.

Daha sonra ardışık x değerleri hesaplanırsa: $f(x)= x^2-2x+1$

Hangi yöntem kullanılacaksa x ona göre seçilir.

$f(x^{k+1}) - f(x^k) < \epsilon$ olduğunda durulur.

Burada,

k= iterasyon sayısı

ϵ= Önceden belirlenmiş olan hata payı veya hassaslık derecesi

Dolaylı yöntemin avantajı = Sayısal yöntemlere göre yakınsaklık daha hızlıdır.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Doğrudan yöntemin avantajı = Süreksiz, eğimli ve son nokta bulunduran fonksiyonlarla ilgili problemleri daha kolay çözer. Ayrıca ekstremum yakınlarındaki f(x) karakteri görülür.

Örnek olarak:

$f(x)=f(x_1,x_2....x_n)$ doğrusal olmayan bir fonksiyon olsun.

Dolaylı yöntem yapılacaksa kısmi türevler alınır.

$df(x)/dx_1=fx_1(x)=0$

$df(x)/dx_n=fx_n(x)=0$

Verim iyiyse kısmi türevlerin sıfır olduğu görülür.

Bu kısmı türevlerden sonra problem doğrusal olmayan eşitliklere dönüşmüş oldu, bu şekilde çözüm zor.

Çoğu mühendis küçültme problemlerini doğrudan bir sayısal yöntem kullanarak çözmektedir

Tek değişkenli fonksiyonu optimize etmek için sayısal yöntemler

Tek değişkenli fonksiyonların lokal minimumunu bulmak için birçok sınırlı ve sınırsız optimizasyon algoritması mevcuttur. Wilde (1964) ve diğer genel optimizasyon kitapları tek boyutlu araştırma teknikleriyle minimum noktanın sapmasını hesaplar. Bu yöntemleri kullanmak için amaç fonksiyonunun minimumunu ve aralığın tek biçiml halinin Δ^0 parantezine alınmış halini bilmek gerekir. Genel fonksiyonun optimizasyor için tek ve öncelikli olup olmadığına karar vermek zordur. Fakat çoğu önemli kaynak amaç fonksiyonunun unimodellik sergilediğini göstermektedir. Başlangıç aralığını son aralığa (Δ^n) dönüşmesinin çeşitli yolları vardır.

Tek değişkenli bir fonksiyonun optimizasyonu için bir yöntem

X değerleri için istediğin uygun değerleri seç ve her değerin fonksiyon değeri hesapla. F(x)'in en iyi değeri optimum olacaktır. Bu yöntem optimumu bulmak iç yeterli değilse bile kabul edilebilir, sonuçları tahmin etmeye olanak sağlar.

Tarama ve Parantezleme Prosedürleri

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Newton, Quasi Newton, Secant Yöntemleri

Optimal koşullarda tek değişkenli fonksiyonların extremumunu bulmak için 3 temel yöntem var.

1- Newton Yöntemi
2- Newton yönteminin sınırlı farkla yaklaştırılması (Quasi-Newton)
3- Secant Yöntemi

Her yöntem için yakınsama dereceleri bulunarak karşılaştırılarak hangisinin daha efektif olduğu bulunabilir.

Yakınsama derecesi bulma yolu:

Doğrusal denklemler için:

$$\frac{\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}^{k} - \mathbf{x}^*\|} \leq c \qquad 0 \leq c \leq 1$$

Bu şekilde çözüm pratikte yavaştır.

Dereceli denklemler için:

$$\frac{\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}^{k} - \mathbf{x}^*\|^p} \leq c \qquad c \geq 0, p \geq 1$$

Bu şekilde çözüm pratikte hızlıdır. p=2 olursa yakınsama derecesi 2 olur.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Newton Yöntemi

F(x)'in lokal minimumunun olması şartı f'(x)=0 idi. F'(x)=0 fonksiyonunu Newton yöntemine göre çözersek:

$x^{k+1} = x^k - f'(x^k)/f''(x^k)$ elde edilir.

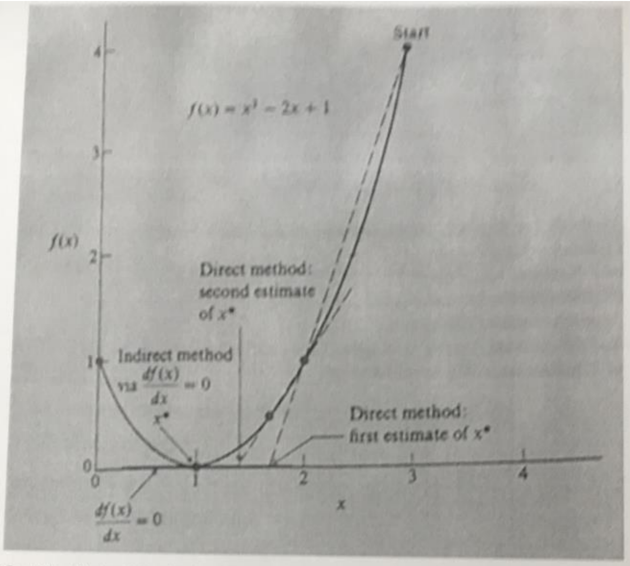
Minimum için: $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ olmalıdır

$$f(x) = f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) + \tfrac{1}{2}f''(x^k)(x - x^k)^2$$

x^k'daki ikinci dereceden model bu şekilde belirtilir.

F'(x)=0 bulunursa denklem: $f'(x^k) + (\tfrac{1}{2})(2)f''(x^k)(x - x^k) = 0$ şeklinde olur.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001



Şekil2. f'(x)=0 fonksiyonunun Newton yöntemi uygulanmış halinin grafiksel gösterimi.

Newton Yönteminin Avantajları

1- $f''(x) \neq 0$ olduğu sürece lokal quadratic extremuma yakınsanır.
2- İkinci dereceden bir fonksiyon için minimum, bir iterasyonla elde edilir.

Newton Yöntemini Dezavantajları

1- f'(x) ve f''(x) hesaplanmalıdır.
2- Eğer $f''(x) \to 0$ ise yakınsama yavaş olur.
3- Eğer birden fazla extremum varsa, yöntem istenilen extremumu yakınsayamaz. Ve osilasyon olur.

Quasi- Newton Yöntemi

Newton yönteminin bir imitasyonudur. Eğer f(x) verilmemişse veya formül çok karmaşıksa ve analitik türevi alınamıyorsa şu formül kullanılır:

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

$$x^{k+1} = x^k - \frac{[f(x+h) - f(x-h)]/2h}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]/h^2}$$

Burada,

h: basamak boyutu

Bu yöntemin dezavantajı basamak boyutunun belirlenmesi gerektiğidir. Ayrıca her k iterasyonu için fonksiyon değerlendirilmelidir.

Secant Yöntemi

Yakınsama modeli bu yöntem için şöyle çözülmüştür.

$f'(x^k) + m(x-x^k)=0$

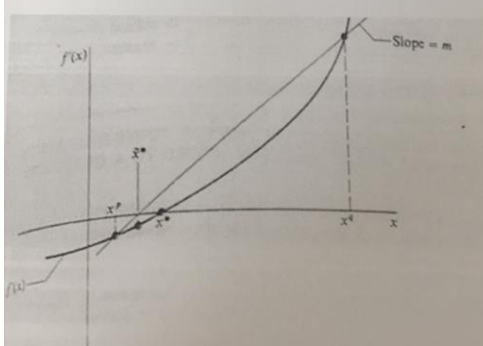
Burada,

m: x^p ve x^q'nun eğimi olup

$$m = \frac{f'(x^q) - f'(x^p)}{x^q - x^p}$$

şeklinde tanımlanmıştır.

Secant, f'(x)'i düz çizgi olacak şekilde yakınsar. $x^q \rightarrow x^p$, m= f(x)'in ikinci türevine yaklaşır.



Şekil3. F'(x)=0 fonksiyonunun Secant yöntemiyle çözümünün grafiksel gösterimi

$$\tilde{x}^* = x^q - \frac{f'(x^q)}{[f'(x^q) - f'(x^p)]/(x^q - x^p)}$$

Burada

$\tilde{x}^*$: x^*'ın bir iterasyonlu halini göstermektedir.

Örnek 1: $f(x)= x^2-x$ fonksiyonunu bu 3 yöntem ile minimize ediniz.

Varsayımlar

1- x aralığımız [-3,3] olsun.
2- $x^0=3$ minimizasyonun başlangıç noktası olsun.

<u>Newton yöntemine göre:</u>

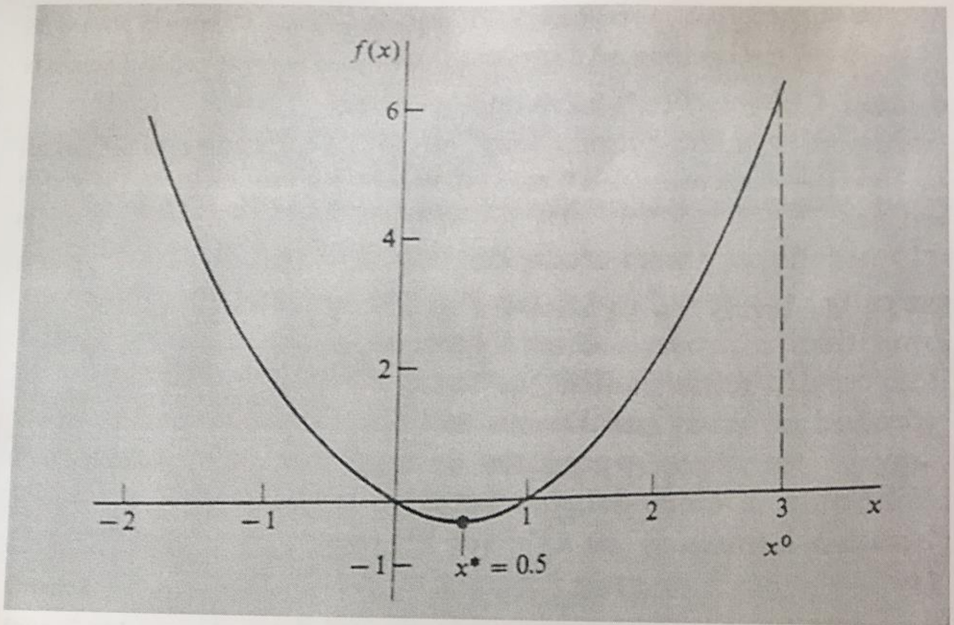
$f(x)= x^2-x$

$f'(x)=2x-1$

$f''(x)=2$ (İkinci türev her zaman pozitif olmalı)

$x'= x^0 - f'(x^0)/f''(x^0)$ .... $x'=3-5/2= 0.5$

Fonksiyon ikinci dereceden ve f'(x) doğrusal olduğundan minimum, bir adımda elde edilir.



Şekil4. Newton yöntemine göre $x^*=0.5$ değerinin grafik üzerinde gösterilmesi

<u>Quasi- Newton yöntemine göre:</u>

$$x^{k+1} = x^k - \frac{[f(x+h) - f(x)]/h}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]/h^2}$$

idi.

$h=10^{-3}$ varsayımı yapılırsa; $x^0=3$ ve $x=3$ olur.

$$x^1 = 3 - \frac{[f(3.001) - f(3.0)]/10^{-3}}{[f(3.001) - 2f(3.0) + f(2.999)]/(10^{-3})^2}$$

$$= 3 - (10^{-3})\frac{(6.005001 - 6.000000)}{(6.005001 - 12.000000 + 5.995001)}$$

$$= 3 - (10^{-3})\frac{0.005001}{0.000002} = 3 - 2.500500$$

$$= 0.499500$$

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Bu şekilde x* değeri 0.499500 bulunmuş oldu. Daha hassas bir sonuç için daha küçük bir h değeri ile tekrar denenebilir. (Newtonda 0.5 bulunmuştu.)

Secant Yöntemine göre:

$f(x)= x^2-x$

$f'(-3)= -7$

$f'(3)=5$

$$x^1 = 3 - \frac{5}{[5-(-7)]/[3-(-3)]} = 3 - 2.5 = 0.5$$

x*=0.5 bulunur.

Örnek 2:

$f(x)= x^4-x+1$

Görüldüğü üzere bu denklem ikinci dereceden bir denklem değil. Aynı yöntemlerle çözelim.

Başlangıç noktası x=3 olsun. Bu varsayımda f(x)'i, x'teki değişim 10^{-7}'den küçük olana kadar minimize edelim.

Newton Yöntemi için:

$f'(x)=4x^3-1$

$f''(x)=12x^2$

$$x_1 = x_0 - \frac{4x_0^3 - 1}{12x_0^2}$$

$$= 3 - \frac{107}{108} = 2.009259$$

Eğer denklem ikinci dereceden olsaydı x_0'ı bilip x_1'i bulmak yeterli olacaktı. Ancak denklem ikinci dereceden değil. Bu yüzden aynı işlem x_2'nin x_1 cinsinden tekrar yapılmalı. Yani bulunan x_1 değerini kullanarak x_2'yi hesaplayacağız.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

$$x_2 = 2.00926 - \frac{31.4465}{48.4454} = 1.36015$$

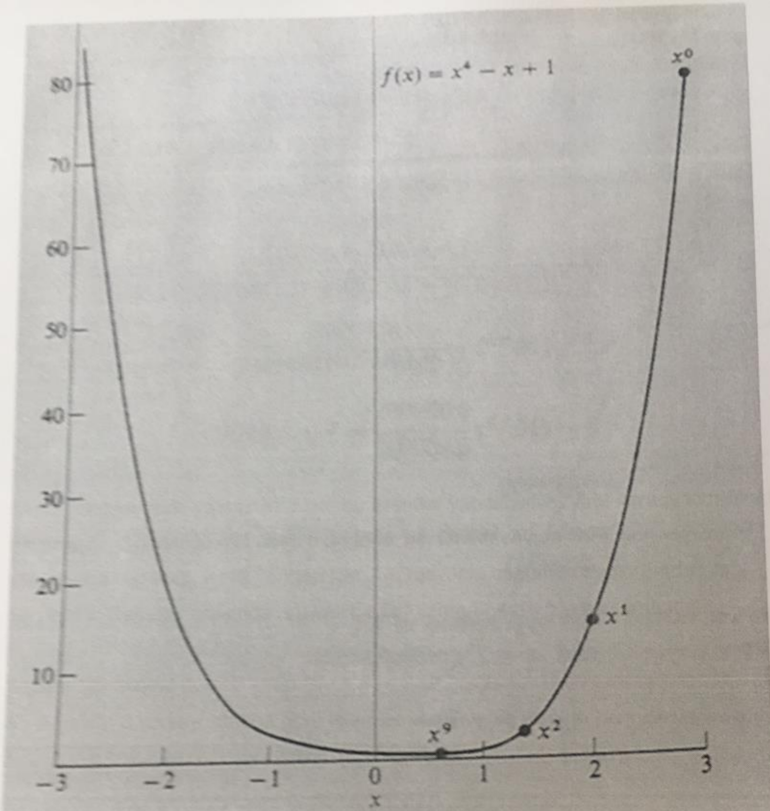
Bu şekilde x değerlerinin arasındaki fark 10^{-7}'den küçük olana kadar işlemlere devam edilmiş ve Çizelge 2 oluşturulmuş.

Çizelge 2. x değerinin belirlenmesi için yapılan 9 iterasyon sonuçları

k	x^k	$\dfrac{x^{k+1} - x^*}{x^k - x^*}$
0	3.00000	
1	2.009259	0.582
2	1.3601480	0.529
3	0.9518103	0.440
4	0.7265254	0.300
5	0.6422266	0.148
6	0.6301933	0.016
7	0.6299606	0.000
8	0.6299605	
9	0.6299605	

Bu sonuçlar grafiğe geçirildiğinde iterasyon sayısı arttıkça x değerinin minimum noktaya yaklaştığı görülmektedir. Son iki değer arasındaki fark 10^{-7}den küçük olduğu için itersyona son verilmiştir.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001



Şekil 5. İterasyonlara devam edildikçe x değerinin minimuma yaklaşması

Quasi- Newton yöntemine göre:

$h=10^{-4}$ varsayımı için

$$x^{k+1} = x^k - \frac{h}{2}\frac{[f(x+h) - f(x-h)]}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]}$$ idi.

$$x^1 = 3 - \left[\frac{10^{-4}}{2}\right]\frac{[f(3.0001) - f(2.9999)]}{[f(3.0001) - 2f(3.000) + f(2.9999)]}$$

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Bu işlemin sonucundan x^1= 2.00926 bulunur. Farklı h değerleri için hesaplamalar yapılmış ve çizelge halinde verilmiştir.

	x^k		
k	$h = 0.10$	$h = 10^{-4}$	$h = 10^{-7}$
0	3.00000	2.00926	3.00000
1	2.00833	1.36015	2.21568
2	1.35816	0.951811	1.46785
3	0.948531	0.726526	0.955459
4	0.721882	0.642227	0.736528
5	0.636823	0.630193	0.642986
6	0.624849	0.629960	0.631846
7	0.624668	0.6299605191	0.630035
8	0.624669	....	0.629964
9	0.624669313	....	0.629961
10	....	....	0.629961
11	....	....	0.629960525

$h>10^{-7}$ değerlerinde yalnızca bir kez bu işlemler yapılabilmiş, yani iterasyon mümkün olmamıştır. Görüldüğü gibi farklı h değerleri için farklı sayıda iterasyon yapılarak yakınsama sağlandı. $h=10^{-4}$ değeri için 7 iterasyonla çözüme ulaşıldığından h_{opt} denilebilir. Değerler arasında anlamlı bir fark olmadığında işlem durmuştur.

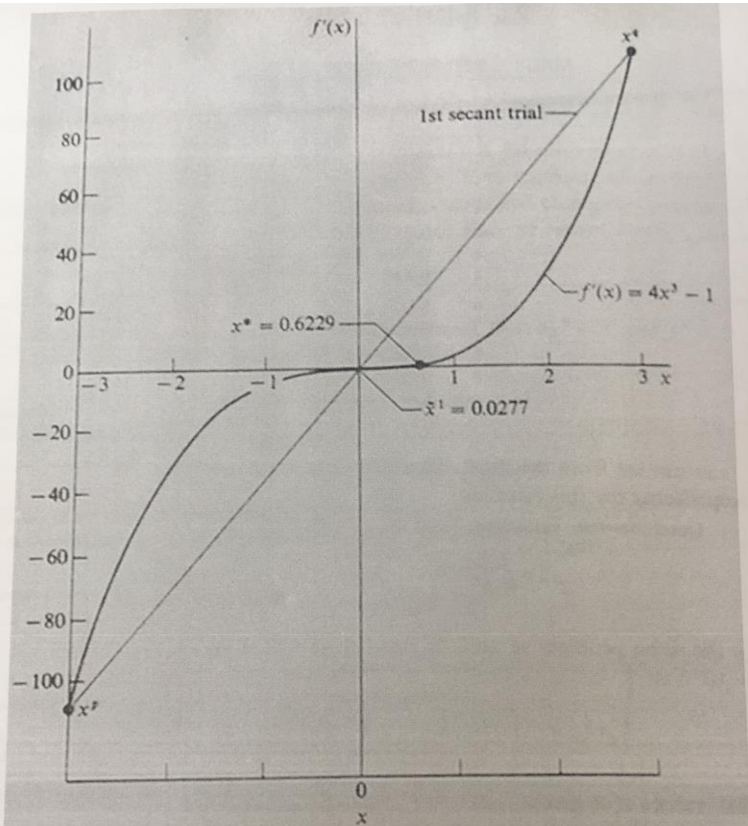
Secant Yöntemine göre:

X^q=3 ve x^p=-3 varsayımlarına göre işlemler yapılmış ve çizelge halinde verilmiştir.

k	x^q	x^p	$f'(x^p)$
0	3.0	−3.0	−109.0000
1	3.0	0.0277778	−0.9991
2	3.0	0.055296	−0.9992
3	3.0	0.0825434	−0.9977
4	3.0	0.1094966	−0.9899
5	3.0	0.1361213	−0.9899
20	3.0	0.4593212	−0.6124
50	3.0	0.6223007	−0.0360
100	3.0	0.6299311	-1.399×10^{-4}
132	3.0	0.6299597	-3.952×10^{-6}

Sabit x^q değerine karşılık x^p'nin değişimi görülür. Grafiğe geçirildiğinde:

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001



Denemeler devam ettikçe x^* değeri sıfıra yaklaşır ve bir süre sonra denemeler arasında anlamlı bir fark kalmaz. Bulunan son değer fonksiyon değerini minimum yapan değerdir.

Üç farklı yöntem içinde yaklaşık olarak aynı sonuçlar elde edilmiştir.

Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001