Naval Architecture & Ocean Engineering

Computer Aided Ship Design

-Part I. Optimal Ship Design-

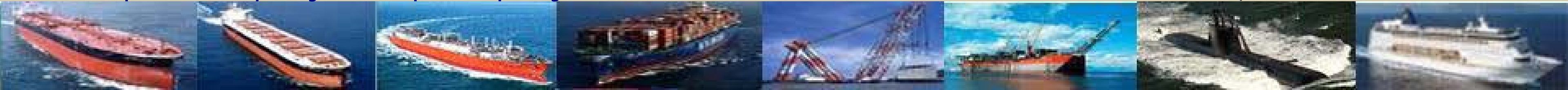
September, 2009

Prof. Kyu-Yeul Lee

Department of Naval Architecture and Ocean Engineering,
Seoul National University of College of Engineering

Seoul National Univ.

@SDAL
Advanced Ship Design Automation Lab.
http://asdal.snu.ac.kr



Contents - Optimization

Contents - Optimization

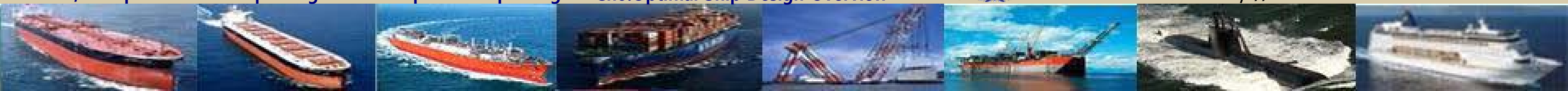
Contents - Optimization

Reference-Optimization

1) Rao,S.S., Engineering Optimization –Theory and practice, Third edition, Wiley, 1996
2) Arora,J.S., Introduction to Optimum Design, second edition, Elsevier, 2004
3) Vanderplaats, G.N., Numerical Optimization Techniques for engineering design with applications, McGraw-Hill,1984
4) Edgar, T.F., Himmelblau, D.M., Optimization of chemical process, McGraw-Hill, 1988
5) Reklatis, G.V., et al, Engineering Optimization – Methods and Applications, Wiley, 1983
6) Erwin Kreyszig, Advanced Engineering Mathematics, Wiley, 2005
7) 노명일,'협동 최적화 방법에 의한 다분야 최적화 기법에 관한 연구',석사학위논문, 서울대학교, 2000
8) 임선빈,'복수 트랜스포터의 주행 거리 및 간섭 최소화를 고려한 최적 블록 운반 계획', 석사학위논문,서울대학교,2008
9) 서울대학교 OCW(Open CourseWare) http://ocw.snu.ac.kr

Ch.0 Optimal Ship Design Overview

Seoul National Univ.
@SDAL
Advanced Ship Design Automation Lab.
http://asdal.snu.ac.kr



부정방정식

변수: x_1, x_2, x_3

식: $x_1 + x_2 + x_3 = 3$

✓ **변수의 개수: 3개**

✓ **식의 개수: 1개**

변수의 개수가 식의 개수보다 많으므로

위의 문제는 부정 방정식이다.

위의 부정 방정식 해법

2개의 변수를 가정한다.

↑

변수의 개수(3) – 식의 개수(1)

예) $x_1 = 1, x_2 = 0$**로 가정**

→ $x_3 = 2$

Equation of straight line

$$y = a_0 + a_1 x$$

a_0, a_1: given

✓ **변수의 개수: 2개** x, y

✓ **식의 개수: 1개**

☞ x**를 가정하여 임의의** x **에 대한** y**를 알 수 있다.**

Find Intersection point (x^*, y^*) of two straight lines

$$y = a_0 + a_1 x$$

$$y = b_0 + b_1 x$$

a_0, a_1, b_0, b_1: given

✓ **변수의 개수: 2개** x, y

✓ **식의 개수: 2개**

부정 방정식과 그 해법

연립 방정식

변수: x_1, x_2, x_3

식: $f_1(x_1, x_2, x_3)=0$

$f_2(x_1, x_2, x_3)=0$

$f_3(x_1, x_2, x_3)=0$

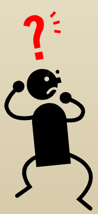
식 f_1, f_2, f_3 이 모두 독립이라면

✓ 변수의 개수: 3개

✓ 식의 개수: 3개

식의 개수와 변수의 개수가 같으므로 풀 수 있는 문제

만일 $2\times f_3 = f_2$ 라면?



f_2는 f_3로 표현이 가능하므로 독립이 아님

서로 독립인 식의 개수가 변수의 개수보다 적으므로 **부정 방정식**이 된다.

부정 방정식

변수: x_1, x_2, x_3

식: $f_1(x_1, x_2, x_3)=0$

$f_2(x_1, x_2, x_3)=0$

$f_3(x_1, x_2, x_3)=0$

식 f_1, f_2 이 서로 독립이라면

✓ 변수의 개수: 3개

✓ 식의 개수: 2개

식의 개수가 변수의 개수보다 적으므로 식을 추가하여 해를 구한다.

추가한 식	구한 해
$f_4^1 = 0$	(x_1^1, x_2^1, x_3^1)
$f_4^2 = 0$	(x_1^2, x_2^2, x_3^2)
⋮	

추가한 식에 따라 무수히 많은 해가 구해짐
→ 부정 방정식

무수히 많은 해 중 어떤 것이 좋은지 판단할 기준이 필요하며, 판단 기준으로서 목적함수를 추가하면 **최적화 문제**가 된다.

Design

Esthetic* Design

구하는 값(설계 변수)

- 팔 길이, 소재, 색상 등..

제약 조건

- 제약 조건이 있지만 수치화 하기 어려움
- Designer의 설계 감각으로 제약 조건을 만족시킴

목적 함수(주요 치수 선정 기준)

- 선호도, 가격 등..
- 설계 변수로서 수치화 하기 어려움

* 미적가치관, 미적인 감각

선박 주요 치수 (L,B,D,T,C_B) 결정 문제의 수학적 모델(요약)
- "개념설계 방정식"

구하는 값(설계 변수) L, B, D, C_B
길이 폭 깊이 방형 계수

주어진 값(선주 요구 조건) $DWT, V_{H\_req}, T_{\max}(=T), V$
재화 중량 요구 화물창 용적 최대 흘수 선속

물리적 제한 조건

→ **부력(buoyancy)-중량(Weight) 평형 조건**(등호 제약 조건)

$$L \cdot B \cdot T \cdot C_B \cdot \rho_{sw} \cdot C_\alpha = DWT_{given} + LWT(L, B, D, C_B)$$

$$= DWT_{given} + C_s \cdot L^{1.6}(B+D) + C_o \cdot L \cdot B$$

$$+ C_{power} \cdot (L \cdot B \cdot T \cdot C_B)^{2/3} \cdot V^3 \quad \cdots (2.3)$$

선주 요구 조건(인위적 제한 조건)

→ **요구되는 화물창 용적(cargo capacity) 조건**(등호 제약 조건)

$$V_{H\_req} = C_H \cdot L \cdot B \cdot D \cdots (3.1)$$

- DFOC(Daily Fuel Oil Consumption)
  + 저항 추진과 관련이 있음
- 납기일(Delivery Date)
  + 생산 공정과 관련이 있음

국제 규약 조건

→ **최소 요구 건현 조건(1966 ICLL)**(부등호 제약 조건)

$$D \geq T + C_{FB} \cdot D \cdots (4)$$

목적 함수(주요 치수 선정 기준)

$$Building\ Cost = C_{PS} \cdot C_s \cdot L^{1.6}(B+D) + C_{PO} \cdot C_o \cdot L \cdot B + C_{PM} \cdot C_{power} \cdot (L \cdot B \cdot T \cdot C_B)^{2/3} \cdot V^3$$

➡ **미지수 4개(L,B,D,C_B), 등호 제약 조건 2개 ((2.3),(3.1)) 부등호 제약 조건 1개((4))인 최적화 문제**

선박 주요치수 결정 최적화

Engineering Design

최적화 문제

➡ 제약 조건을 만족하면서
목적함수를 최소화(최대화)하는
설계 변수를 결정 하는 것

구하는 값(설계 변수)

x_1, x_2, x_3, x_4

등호 제약 조건

$h(x_1, x_2, x_3, x_4)=0$

부등호 제약 조건

$g(x_1, x_2, x_3, x_4)\le 0$

목적 함수

$f\ (x_1, x_2, x_3, x_4)$

구하는 값(설계 변수)

$L(=x_1), B(=x_2), D(=x_3), C_B(=x_4)$

길이 폭 깊이 방형 계수

부력(buoyancy)-중량(displacement) 평형 조건(등호 제약 조건)

$$L\cdot B\cdot T\cdot C_B\cdot \rho_{sw}\cdot C_\alpha = DWT_{given} + LWT(L,B,D,C_B)$$

$$x_1\cdot x_2\cdot x_4\cdot C_1 = C_2 + h'(x_1,x_2,x_3,x_4)$$

$$x_1\cdot x_2\cdot x_4\cdot C_1 - C_2 + h'(x_1,x_2,x_3,x_4) = h(x_1,x_2,x_3,x_4) = 0$$

목적 함수(주요 치수 선정 기준)

$$Building\ \ Cost = C_{PS}\cdot C_s\cdot L^{1.6}(B+D) + C_{PO}\cdot C_o\cdot L\cdot B + C_{PM}\cdot C_{ma}\cdot NMCR$$

$$f(x_1,x_2,x_3,x_4) = C_3\cdot x_1^{1.6}(x_2+x_3) + C_4\cdot x_1\cdot x_2 + C_5$$

- C_i , ρ_{sw}, DWT_{given}, $NMCR$: 주어진 계수

제약조건의 특징

✓ 물리 법칙은 보통 등식으로 표현 됨 (선박 설계의 예: 부력-중량 평형 조건)
✓ 정치, 경제, 사회, 문화적으로 정의된 규약이나 조건은 부등호 제약 조건식으로 표현 된다.
(선박 설계의 예: 최소 요구 건현 조건, 요구되는 화물창 용적 조건)

Classification of Optimization problem

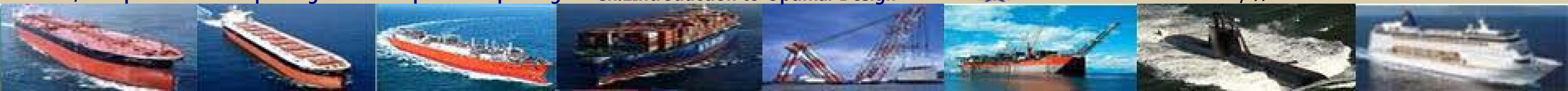
<table>
<tr><td rowspan="2"></td><td colspan="2">Unconstrained Optimization problem</td><td colspan="3">Constrained Optimization problem</td></tr>
<tr><td>Linear</td><td>Nonlinear</td><td>Linear</td><td colspan="2">Nonlinear</td></tr>
<tr><td>Objective function (example)</td><td>minimize $f(\mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2$</td><td>minimize $f(\mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 3x_1x_2$</td><td>minimize $f(\mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2$</td><td>minimize $f(\mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 3x_1x_2$</td><td>minimize $f(\mathbf{x})$
$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 3x_1x_2$</td></tr>
<tr><td>Constraint (example)</td><td>None</td><td>None</td><td>$h(\mathbf{x}) = x_1 + 5x_2 = 0$
$g(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$</td><td>$h(\mathbf{x}) = x_1 + 5x_2 = 0$
$g(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$</td><td>$g_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{6}x_1^2 + \frac{1}{6}x_2^2 - 1.0 \le 0$
$g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$</td></tr>
<tr><td rowspan="3">Mathematical Optimization
-Continuous value</td><td colspan="2" rowspan="3">① Direct Search Method
- Hooke&Jeeves
- Nelder&Mead

② Gradient Method
- Steepest Descent Method
- Conjugate Gradient Method
- Newton Method
- Davidon-Fletcher-Powell(DFP) Method
-Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) Method</td><td>Penalty Function으로 해를 구할 수 있으나 일반적으로 선형 계획법을 사용</td><td colspan="2">- Penalty Function[1)]을 구성한 후 비제약 최적화 문제로 변환한 후 해를 구함</td></tr>
<tr><td>- Simplex method
(Linear Programming)</td><td rowspan="2">- 2차 계획 법
(Quadratic Programming)</td><td>- 근사화 방법 – SLP
선형 계획 문제[2)]로 근사화 후 개선된 탐색점을 찾고, 그 점에서 다시 선형 계획 문제를 푸는 방법</td></tr>
<tr><td></td><td>- 근사화 방법 – SQP
2차 계획 문제[3)]로 근사화 후 개선된 탐색점을 찾고, 그 점에서 다시 2차 계획 문제를 푸는 방법</td></tr>
<tr><td>Mathematical Optimization
-Discrete value</td><td colspan="5">-Integer programming
① Cut Algorithm
② Enumeration Algorithm
③ Constructive Algorithm</td></tr>
<tr><td>Heuristic Optimization</td><td colspan="5">Genetic Algorithm(GA), Ant Algorithm, Simulated Annealing, etc</td></tr>
</table>

Ch.1 Introduction to Optimal Design

Seoul National Univ.

@SDAL
Advanced Ship Design Automation Lab.
http://asdal.snu.ac.kr



1.1 Component of Optimal Design Problem(1)

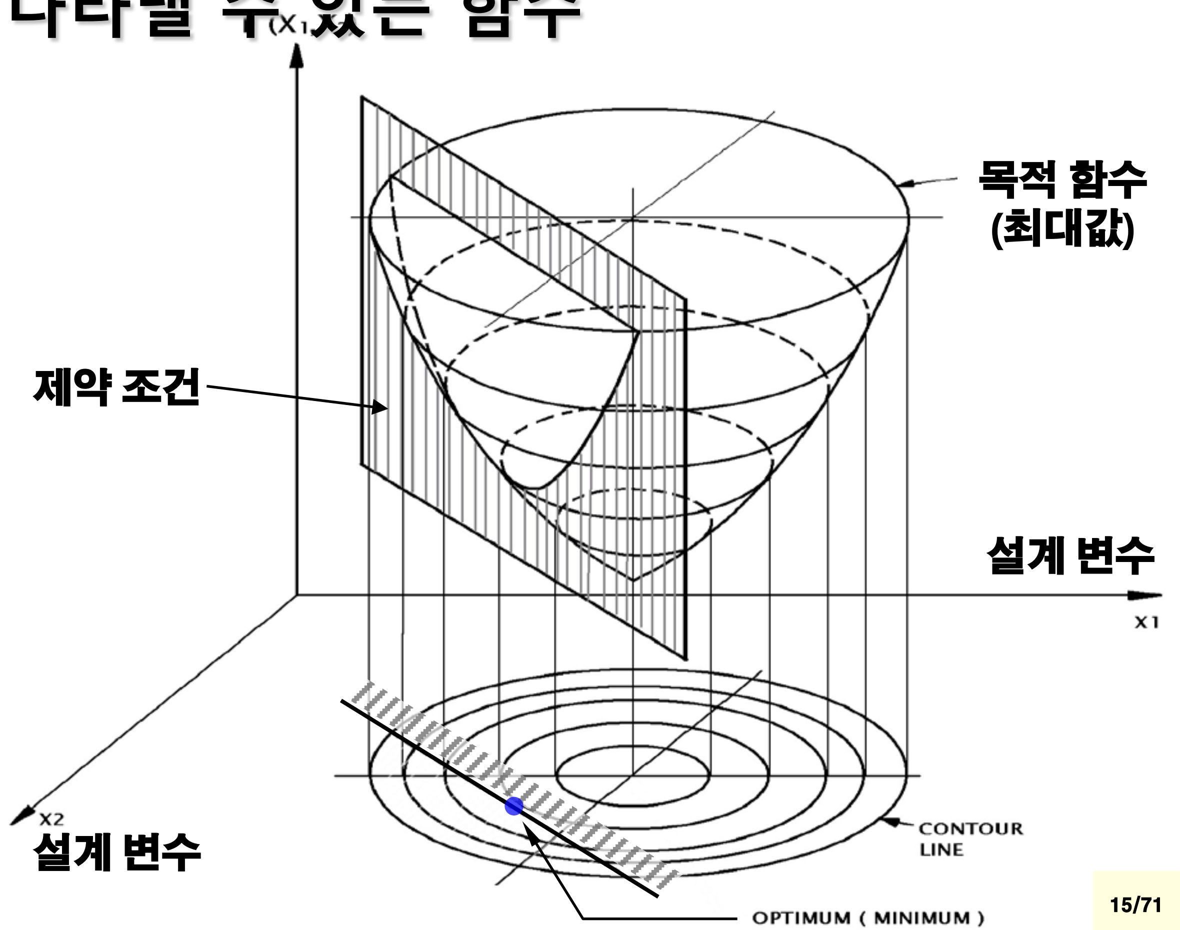
- 설계 변수(Design Variable)
  - 설계하고자 하는 치수, 위치 등을 나타내는 변수로서 자유 변수(Free Variable) 또는 독립 변수(Independent Variable)라고 함
  - 종속 변수(Dependent Variable)
    - 설계 변수의 결정 후 종속적으로 결정되어지는 변수

- 제약 조건(Constraint)
  - 설계에서 기능상 요구되는 조건 또는 크기의 제한 등을 정의
  - 부등호 제약 조건(Inequality Constraint), 등호 제약 조건(Equality Constraint)

1.1 Component of Optimal Design Problem(2)

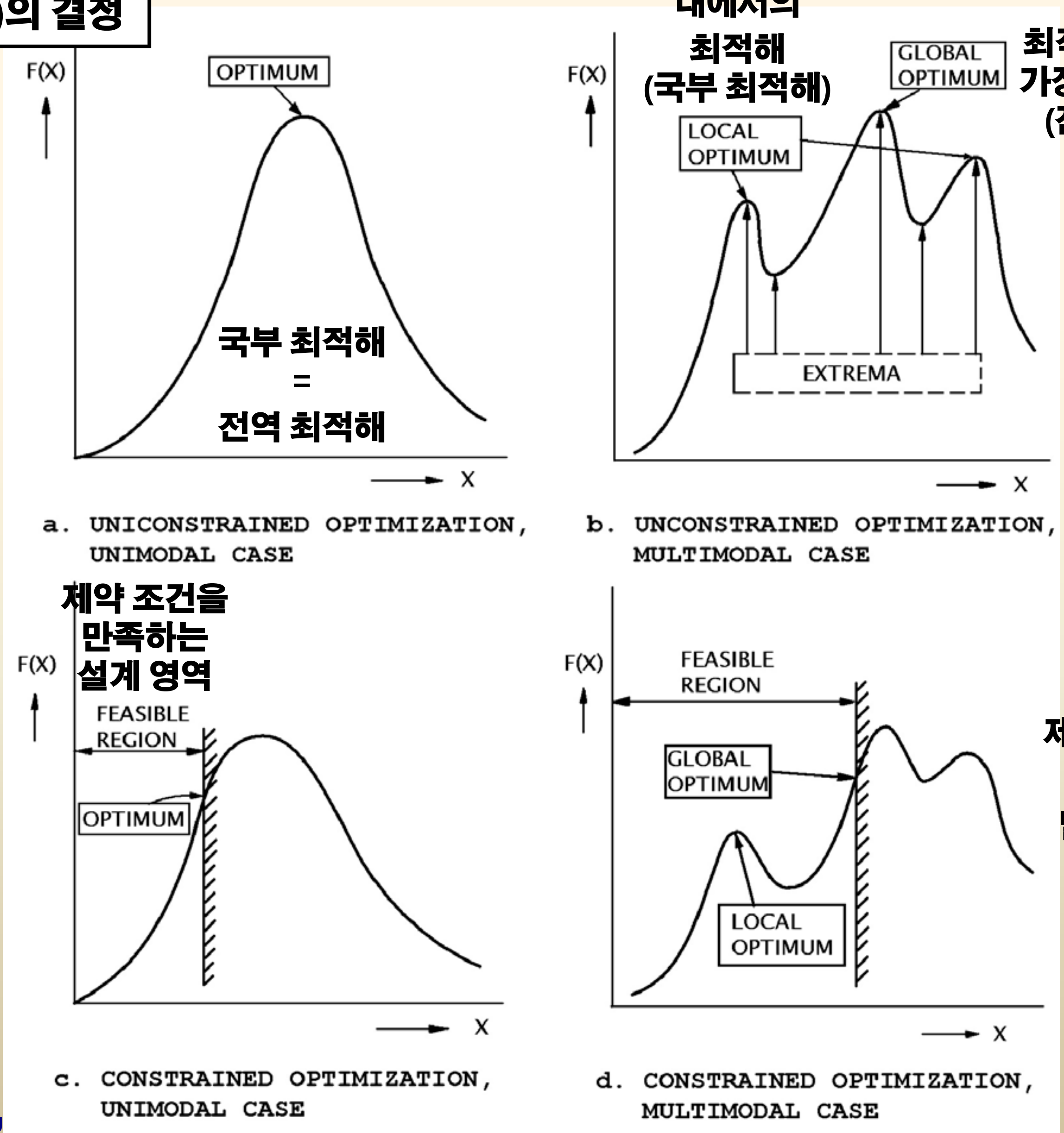
■ 목적 함수(Objective Function)

- ■ 최적(Optimum)을 나타내는 기준으로 비용, 무게 등과 같은 값을 비교하여 어느 설계 대안(Design Alternative)이 보다 나은지를 나타낼 수 있는 함수



1.1 Component of Optimal Design Problem(3)

목적 함수와 제약 조건에 따른 최적해(최대값)의 결정

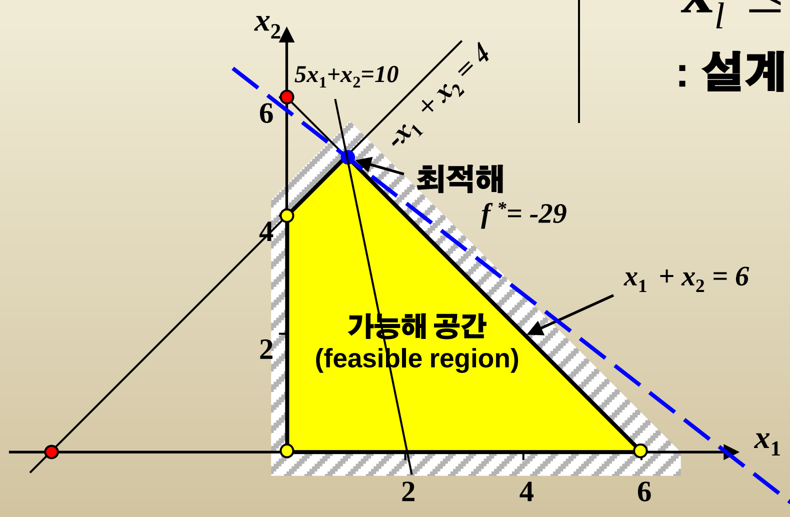


최적해 중에서도 가장 좋은 최적해 (전역 최적해)

제약 조건에 의해 최적해는 달라질 수 있음

1.2 Formulation of Optimal Design Problem

Minimize $f = -4x_1 - 5x_2$	***Minimize*** $f(\mathbf{x})$	**Objective Function**
Subject to	***Subject to***	**Constraints**
$-x_1 + x_2 \le 4 \Rightarrow -x_1 + x_2 - 4 \le 0$ $x_1 + x_2 \le 6 \Rightarrow x_1 + x_2 - 6 \le 0$	$g_j(\mathbf{x}) \le 0,\ j = 1, \cdots, m$: **부등호 제약 조건(Inequality Constraint)**	
$5x_1 + x_2 = 10 \Rightarrow 5x_1 + x_2 - 10 = 0$	$h_k(\mathbf{x}) = 0, k = 1, \cdots, p$: **등호 제약 조건(Equality Constraint)**	
$0 \le x_1, x_2$	$\mathbf{x}_l \le \mathbf{x} \le \mathbf{x}_u$: **설계 변수 벡터에 대한 상·하한값 제약 조건**	



1.3 Classification of Optimization Problems(1)

- 제약조건의 유무
  - Unconstrained optimization problem(Unconstrained Optimization Problem)
    - 제약 조건이 없는 최적화 문제

$$\boxed{\text{minimize } f(\mathbf{x})}$$

  - 제약 최적화 문제(Constrained Optimization Problem)
    - 제약 조건이 있는 최적화 문제

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(\mathbf{x}) \\ \text{Subject to} & h(\mathbf{x})=0 \\ & g(\mathbf{x})\le 0 \end{array}}$$

1.3 Classification of Optimization Problems(2)

■ 목적함수의 수

■ 단일 최적화 문제(Single-Objective Optimization Problem)

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimize} & f(\mathrm{x}) \\
\text{Subject to} & h(\mathrm{x})=0 \\
 & g(\mathrm{x})\le 0
\end{array}
$$

■ 다중 최적화 문제(Multi-Objective Optimization Problem)

- Weighting Method, Constraint Method

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimize} & f_1(\mathrm{x}),\ f_2(\mathrm{x}),\ f_3(\mathrm{x}) \\
\text{Subject to} & h(\mathrm{x})=0 \\
 & g(\mathrm{x})\le 0
\end{array}
$$

1.3 Classification of Optimization Problems(3)

■ 목적함수와 제약조건의 선형성

■ 선형 최적화 문제(Linear Optimization Problem)

- 목적함수와 제약조건이 모두 선형인 문제

minimize

$$f(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2$$

Subject to

$$h(\mathbf{x}) = x_1 + 5x_2 = 0$$

$$g(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$$

■ 비선형 최적화 문제(Nonlinear Optimization Problem)

- 목적함수나 제약조건이 비선형인 문제

minimize

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 3x_1x_2$$

Subject to

$$h(\mathbf{x}) = x_1 + 5x_2 = 0$$

$$g(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$$

minimize

$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 3x_1x_2$$

Subject to

$$g_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{6}x_1^2 + \frac{1}{6}x_2^2 - 1.0 \le 0$$

$$g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$$

1.3 Classification of Optimization Problems(4)

■ 설계변수의 형태

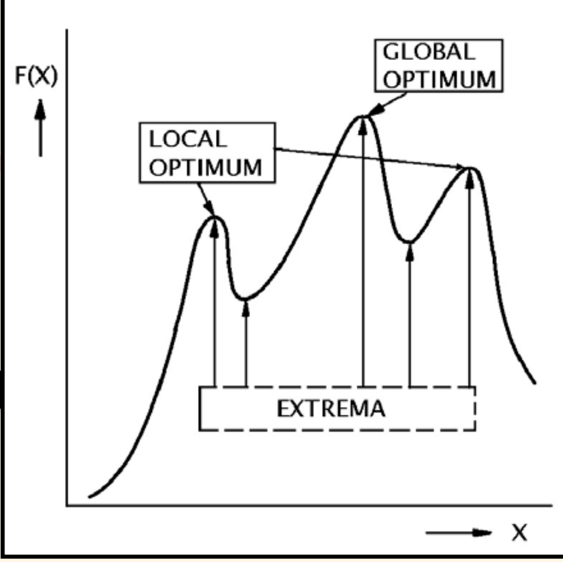
■ 연속적 문제(Continuous Problem)

- 설계변수가 연속적(Continuous)인 문제

■ 이산적 문제(Discrete Problem)

- 설계 변수가 이산적(Discrete)인 최적화 문제
- 조합 최적화(Combinatorial optimization) 문제라고도 함
- 정수계획법(Integer programming;설계 변수가 정수인 최적화 문제)이 대표적

1.3 Classification of Optimization method(1)



- 전역 최적화 기법(Global Optimization Methods)
  - 장점
    - 다수의 국부 최적해(Local Optima)를 가진 대규모 문제에 적합
  - 단점
    - 최적해를 얻기 위해 많은 Iteration이 필요(긴 계산 시간 요구)
  - Genetic Algorithms(GA), Simulated Annealing, etc.

- 국부 최적화 기법(Local Optimization Methods)
  - 장점
    - 최적해를 얻기 위해 상대적으로 적은 Iteration이 필요(짧은 계산 시간 요구)
  - 단점
    - 초기해(Starting Point)에 가까운 국부 최적해를 도출(거의 국부 최적해만 찾음)
  - Method of Feasible Directions(MFD), Sequential Quadratic Programming(SQP), Multi-Start Optimization Method, etc.

Ch.2 Unconstrained optimization method

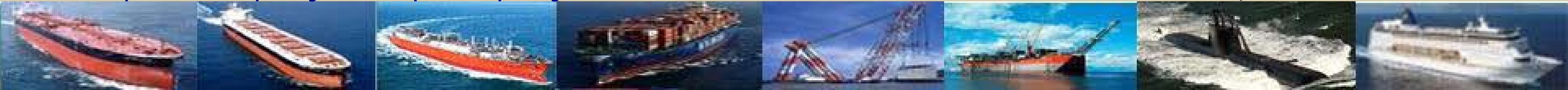
2.1 Gradient method

- Steepest Descent method
- Conjugate Gradient method
- Newton's method
- Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method
- Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method

2.2 Golden Section Search method (one dimensional search method)

2.3 Direct Search Method

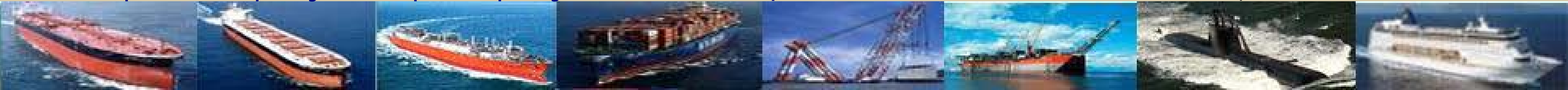
- Hooke & Jeeves's Direct Search method
- Nelder & Mead's Simplex method



Ch.2 Unconstrained optimization method
2.1 Gradient method

Steepest Descent method
Conjugate Gradient method
Newton's method
Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method
Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method

Seoul National Univ.
@SDAL
Advanced Ship Design Automation Lab.
http://asdal.snu.ac.kr



2.1 Gradient method
- Steepest Descent method(최속 강하법)

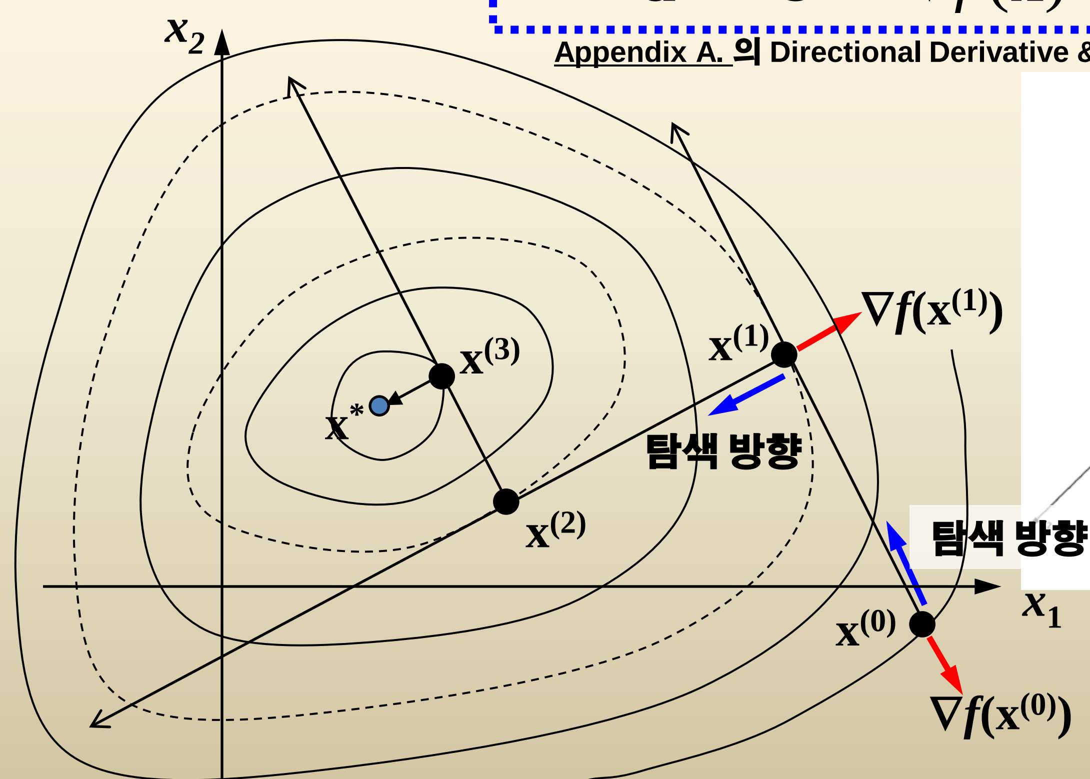
- 탐색 방향(Search Direction)을 목적 함수의 Gradient Vector의 반대 방향으로 가정하고 순차적으로 최적해를 찾는 방법
  - ➡ Gradient Vector(∇f(x)): 함수 값이 최대로 증가하는 방향

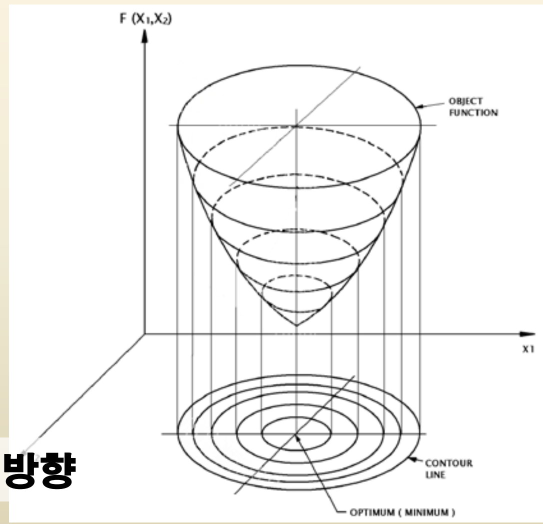
탐색 방향 : 함수 값이 가장 많이 감소하는 방향

$$\mathbf{d} = -\mathbf{c} \equiv -\nabla f(\mathbf{x})$$

<u>목적 함수를 최소화 하는 문제일 경우</u>

<u>Appendix A. 의</u> Directional Derivative & Gradient Vector 참조



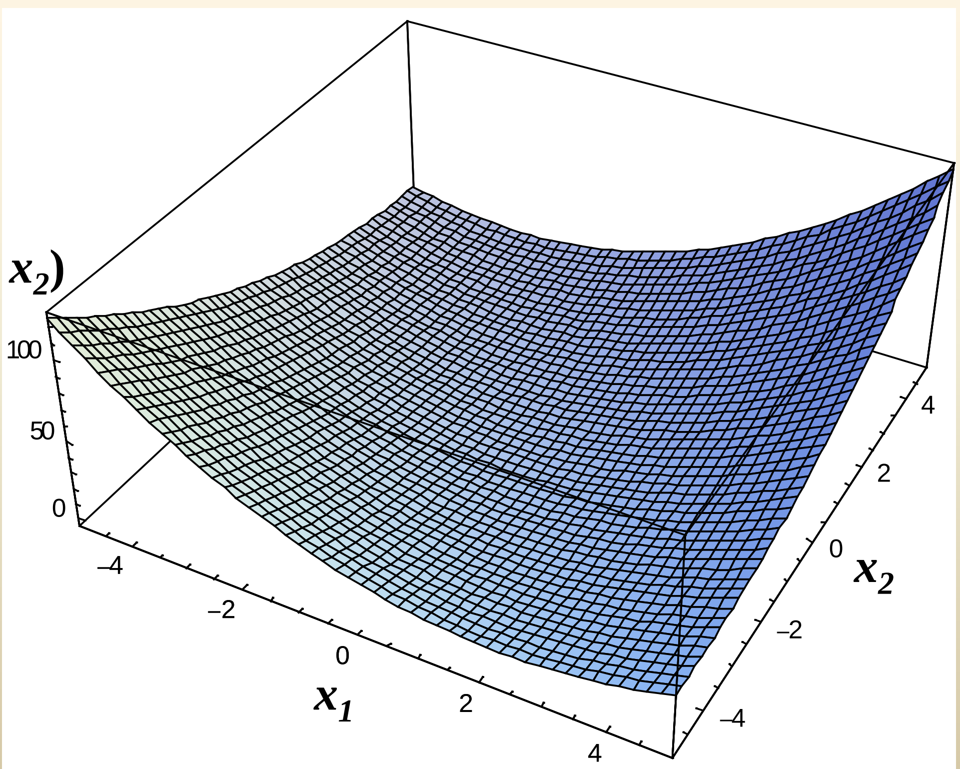


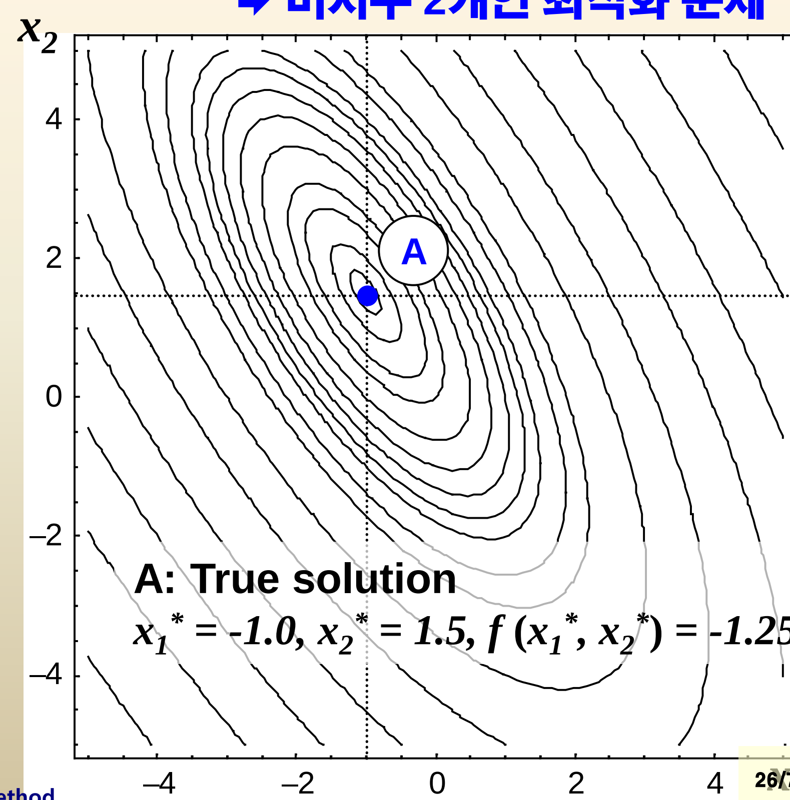
Unconstrained optimization problem

- **Steepest descent method(최속 강하법, 최대 경사법)을 이용하여 2변수 함수의 최소점을 구하시오. 단, 시작점 $x^{(0)}$ = (0, 0), convergence tolerance ε = 0.001이며, $x^{(3)}$까지 구하시오.**

$$\textit{Minimize}\quad f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

➡ 미지수 2개인 최적화 문제





Unconstrained optimization problem
- Steepest descent method을 이용한 해법(1)

$$Minimize \;\; f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

시작점 $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 1 + 4x_1 + 2x_2 \\ -1 + 2x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}$$

■ 단계 1 - $\mathbf{x}^{(1)}$구하기

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \nabla f\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 4x_1 + 2x_2 \\ -1 + 2x_1 + 2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha^{(0)} \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ \alpha \end{pmatrix}$$

편의상 $\alpha^{(0)}$을 α로 대체함

$\mathbf{x}^{(1)} = (-\alpha, \alpha)$를목적함수에대입

$$f(\mathbf{x}^{(1)}) = -\alpha - \alpha + 2\alpha^2 - 2\alpha^2 + \alpha^2$$

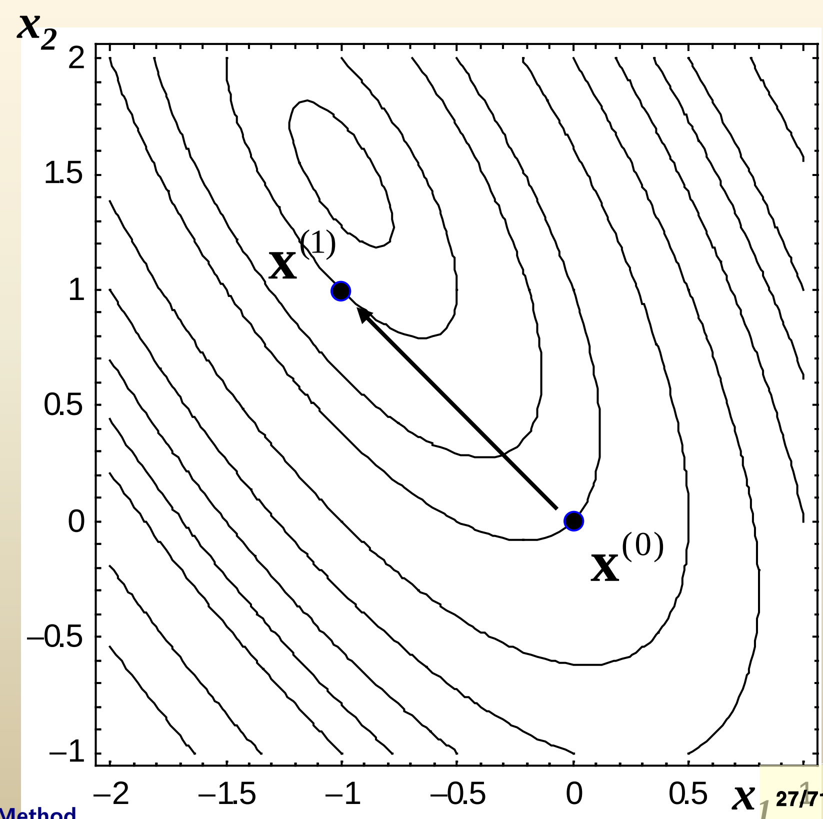
$$= \alpha^2 - 2\alpha$$

함수가 $f(\mathbf{x}^{(1)})$ 최소값을가질조건

$$\boxed{\frac{df(\mathbf{x}^{(1)})}{d\alpha}} = 2\alpha - 2 = 0 \text{으로부터 } \alpha = 1.0$$

$$\therefore \mathbf{x}^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

함수 f를 어떻게 α로 미분 할 수 있는가?



Unconstrained optimization problem
- [참고] x의 함수 f를 x가 아닌 다른 변수로 미분

$$\textit{Minimize}\ \boxed{f(x_1, x_2)} = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

시작점 $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$

■ 단계 1 - $\mathbf{x}^{(1)}$구하기

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \nabla f\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 + 4x_1 + 2x_2\\ -1 + 2x_1 + 2x_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha^{(0)}\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$$

$$= \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix} - \alpha\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\alpha\\ \alpha\end{pmatrix}$$

편의상 $\alpha^{(0)}$을 α로 대체함

$\boxed{\mathbf{x}^{(1)} = (-\alpha, \alpha)}$를 목적함수에 대입

$$f(\mathbf{x}^{(1)}) = -\alpha - \alpha + 2\alpha^2 - 2\alpha^2 + \alpha^2$$

$$= \alpha^2 - 2\alpha$$

함수가 $f(\mathbf{x}^{(1)})$ 최소값을가질조건

$$\boxed{\frac{df(\mathbf{x}^{(1)})}{d\alpha}} = 2\alpha - 2 = 0 \text{으로부터 } \alpha = 1.0$$

$$\therefore \mathbf{x}^{(1)} = \begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}$$

함수 f 를 어떻게 α로 미분 할 수 있는가?

$f(x_1, x_2) = f(\mathbf{x})$ **: 함수 f 는 x에 대한 함수**

$\mathbf{x}^{(1)} = (-\alpha, \alpha)$ **: $\mathbf{x}^{(1)}$는 α에 대한 함수**

→ $\mathbf{x}^{(1)}$를 함수 f 에 대입 하였으므로
함수 f 는 α 에 대한 함수이고,
α로 미분 가능하다.

이와 유사하게 다음도 생각해 볼 수 있다.

함수 $f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x})$가 최소 값을 가질 조건

$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x})$ **의 테일러 전개(2차항까지 고려)**

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \mathbf{c}^T\Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{x}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\ \Delta\mathbf{x}$$

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{c}^T\Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{x}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\ \Delta\mathbf{x}$$

여기서 $\mathbf{x}^*$는 상수이므로, $\Delta\mathbf{x}$를 변수로 취급하여

$$f(\Delta\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T\Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{x}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\ \Delta\mathbf{x}$$

함수 f 가 최소 값을 가질 조건

$$\frac{df(\Delta\mathbf{x})}{d\Delta\mathbf{x}} = \mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\ \Delta\mathbf{x} = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\ \Delta\mathbf{x} = -\mathbf{c}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta\mathbf{x} = -\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)^{-1}\mathbf{c}}$$

'Newton's method'

Unconstrained optimization problem
- Steepest descent method을 이용한 해법(2)

$$\textit{Minimize} \quad f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

■ **단계 2 -** $\mathbf{x}^{(2)}$구하기

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) = \nabla f\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 4x_1 + 2x_2 \\ -1 + 2x_1 + 2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha^{(1)} \nabla f(\mathbf{x}^{(1)})$$

$$= \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 + \alpha \\ 1 + \alpha \end{pmatrix}$$

편의상 $\alpha^{(1)}$을 α로 대체함

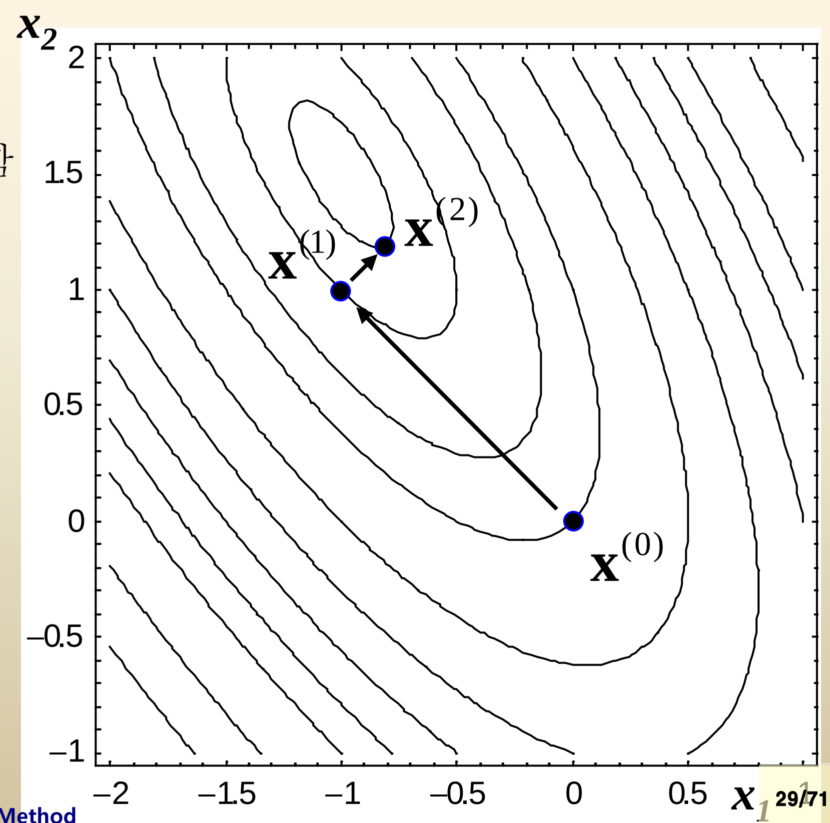
$\mathbf{x}^{(2)} = (-1+\alpha, 1+\alpha)$를목적함수에대입

$$f(\mathbf{x}^{(2)}) = 5\alpha^2 - 2\alpha - 1$$

함수가 $f(\mathbf{x}^{(2)})$ 최소값을가질조건

$$\frac{df(\mathbf{x}^{(2)})}{d\alpha} = 10\alpha - 2 = 0 \text{으로부터} \quad \alpha = 0.2$$

$$\therefore \mathbf{x}^{(2)} = \begin{pmatrix} -0.8 \\ 1.2 \end{pmatrix}$$



Unconstrained optimization problem
- Steepest descent method을 이용한 해법(3)

$$Minimize \quad f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

■ **단계 3 -** $\mathbf{x}^{(3)}$구하기

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(2)}) = \nabla f\begin{pmatrix} -0.8 \\ 1.2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+4x_1+2x_2 \\ -1+2x_1+2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ -0.2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(3)} = \mathbf{x}^{(2)} - \alpha^{(2)}\nabla f(\mathbf{x}^{(2)})$$

편의상 $\alpha^{(2)}$을 α로 대체함

$$= \begin{pmatrix} -0.8 \\ 1.2 \end{pmatrix} - \alpha\begin{pmatrix} 0.2 \\ -0.2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.8-0.2\alpha \\ 1.2+0.2\alpha \end{pmatrix}$$

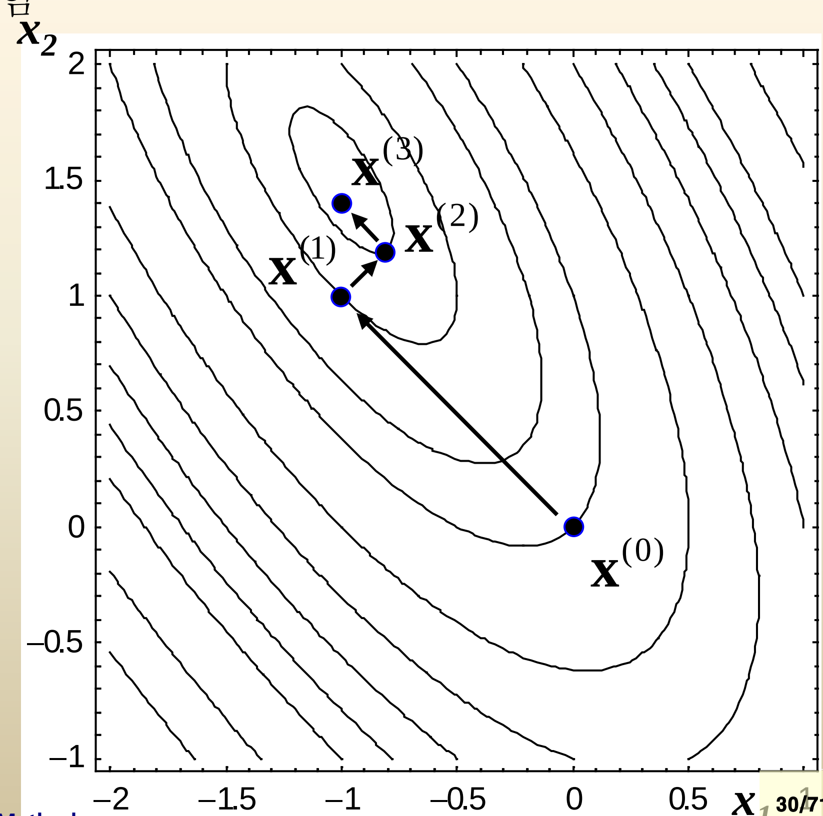
$\mathbf{x}^{(3)} = (-0.8-0.2\alpha, 1.2+0.2\alpha)$를목적함수에대입

$$f(\mathbf{x}^{(3)}) = 0.04\alpha^2 - 0.08\alpha - 1.2$$

함수가 $f(\mathbf{x}^{(3)})$ 최소값을가질조건

$$\frac{df(\mathbf{x}^{(3)})}{d\alpha} = 0.08\alpha - 0.08 = 0 \text{으로부터 } \alpha = 1.0$$

$$\therefore \mathbf{x}^{(3)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1.4 \end{pmatrix}$$

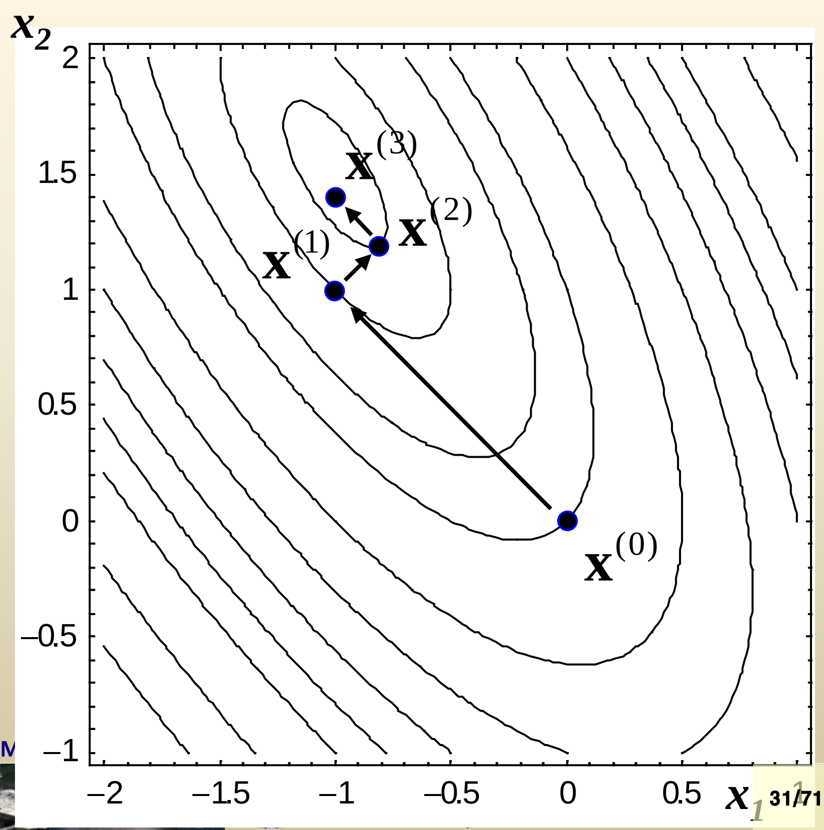


Unconstrained optimization problem
- Steepest descent method을 이용한 해법(4)

$$\mathit{Minimize}\quad f(x_1, x_2) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

■ **단계 4 -** 최적해 구하기

이와 같은 과정을 반복하여 $\left|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\right| \le \varepsilon$일 경우 중지하며 그때의 $\mathbf{x}^{(k+1)}$이 최적해가 된다.



Gradient method
- Conjugate Gradient method (공액 경사도 방법)(1)

■ 탐색 방향을 수정하여 최속 강하법보다 수렴율을 향상시킨 방법. 현재의 최속 강하 방향에 직전에 사용된 탐색 방향을 척도화 시켜 더한 것을 탐색 방향으로 사용함

■ 단계 1 : 초기 설계점 $\mathbf{x}^{(0)}$ 를 추정한다. 반복 횟수 번호를 $k=0$ 으로 둔다.
또한 수렴 매개 변수 ε 을 선정하고 최적 탐색 방향을 계산한다.

$$\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{c}^{(0)} \equiv -\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$$

그리고, $\left\|\mathbf{c}^{(0)}\right\| < \varepsilon$ 식을 만족하면 반복 과정을 마치고 만족하지 않으면 단계 4로 간다(공액 경사법과 최속 강하법의 단계 1은 동일함).

Gradient method
- Conjugate Gradient method (공액 경사도 방법)(1)

■ 단계 2 : 목적 함수의 경사도를 계산한다.

$$\mathbf{c}^{(k)} = \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})$$

여기서, 만일 $\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\| < \varepsilon$ 이면 멈춘다. 그렇지 않으면 계속한다.

■ 단계 3 : 다음과 같이 새로운 탐색 방향을 계산한다.

$$\boxed{\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{c}^{(k)} + \beta_k \mathbf{d}^{(k-1)}} \longrightarrow \text{전 단계의 탐색 방향}$$

$$\beta_k = \left(\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\| / \left\|\mathbf{c}^{(k-1)}\right\|\right)^2$$

전 단계의 탐색 방향을 고려하여 현재의 탐색 방향을 설정한다는 의미

Gradient method
- Conjugate Gradient method (공액 경사도 방법)(2)

$$\boxed{\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{c}^{(k)} + \beta_k \mathbf{d}^{(k-1)}}$$

→ 전 단계의 탐색 방향

$$\beta_k = \left(\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\| / \left\|\mathbf{c}^{(k-1)}\right\|\right)^2$$

전 단계의 탐색 방향을 고려하여 현재의 탐색 방향을 설정한다는 의미

■ 단계 4 : $f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)})$ 를 최소화 하는 $\alpha = \alpha_k$ 를 계산한다.

■ 단계 5 : 현재의 설계점을 다음과 같이 변경한다.

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$$

$k = k + 1$ 로 두고 단계 2로 간다.

Development of Conjugate gradient method[1)]

Minimize

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}^T\mathbf{x} + C$$

Let the first search direction

$$\mathbf{d}^{(0)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = -\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{B}$$

$\mathbf{x}^{(0)}$: starting point for minimization

$\mathbf{d}$: search direction

α : search distance

Let next search direction

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha^{(0)}\mathbf{d}^{(0)}$$

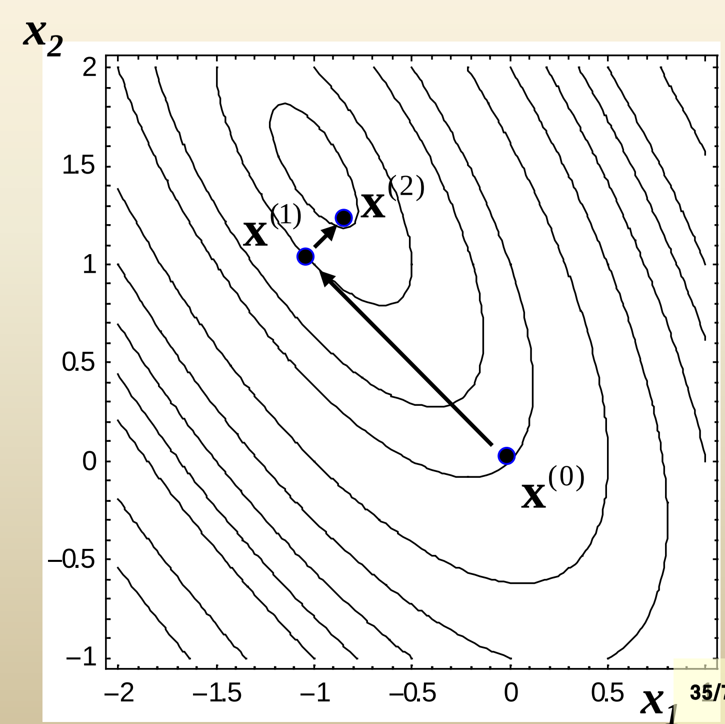
$$\mathbf{d}^{(0)} = \frac{\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}}{\alpha^{(0)}}$$

$$\mathbf{d}^{(0)}\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) = 0$$

why they are orthogonal?

$$\mathbf{d}^{(0)}[\mathbf{A}(\mathbf{x}^{(0)} + \alpha^{(0)}\mathbf{d}^{(0)}) + \mathbf{B}] = 0$$

$$\alpha^{(0)} = \frac{-\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{B})}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T\mathbf{A}\mathbf{d}^{(0)}} = -\frac{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T}\frac{f(\mathbf{x}^{(0)})}{\mathbf{A}\mathbf{d}^{(0)}}$$



1) Rao,S.S.,Engineering optimization 3rd ,wiley,1996,pp384~386

Development of Conjugate gradient method[1)]

Minimize

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}^T\mathbf{x} + C$$

Express the second search direction as a linear combination of $\mathbf{d}^{(0)}$ **and** $\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})$

$$\mathbf{d}^{(1)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) + \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}$$

Imposing the condition that the successive directions be mutually conjugates.

$$\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T \mathbf{A}\mathbf{d}^{(1)} = 0$$ **,(Conjugate direction[2)])**

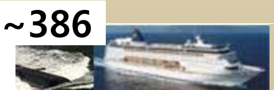
$$\left(\mathbf{d}^{(1)}\right)^T \mathbf{A}(-\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) + \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}) = 0$$

$$-\frac{\left(\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}\right)^T}{\alpha^{(0)}}\mathbf{A}(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}) = 0$$

$$\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}\right) = 0$$

$$\because \nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \nabla f(\mathbf{x}^{(0)}) = \left(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{B}\right) - \left(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{B}\right) = \mathbf{A}\left(\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}\right)$$

1) Rao,S.S.,Engineering optimization 3rd ,wiley,1996,pp384~386
2) Rao,S.S.,Engineering optimization 3rd ,wiley,1996, 358p



Development of Conjugate gradient method[1)]

Minimize

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}^T\mathbf{x} + C$$

$$\mathbf{d}^{(1)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) + \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}$$

$$\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \beta^{(1)}\mathbf{d}^{(0)}\right) = 0$$

$$\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \left(\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) - \beta^{(1)}\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})\right)^T \mathbf{d}^{(0)} + \beta^{(1)}\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \mathbf{d}^{(0)} = 0$$

$$\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) = -\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) = 0$$

$$\beta^{(1)} = -\frac{\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)})}{\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \mathbf{d}^{(0)}} = \frac{\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(1)})}{\left(\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})\right)^T \nabla f(\mathbf{x}^{(0)})}$$

$$\therefore \beta^{(k)} = \frac{\left\|\nabla f(\mathbf{x}^{(k)})\right\|^2}{\left\|\nabla f(\mathbf{x}^{(k-1)})\right\|^2} = \frac{\left\|\mathbf{c}^{(k)}\right\|^2}{\left\|\mathbf{c}^{(k-1)}\right\|^2}$$

1) Rao,S.S.,Engineering opimization 3rd ,wiley,1996,pp384~386

Unconstrained optimization problem
- Solution by Conjugate gradient method (1)

$$\textit{Minimize}\quad f(x_1,x_2)=x_1-x_2+2x_1^2+2x_1x_2+x_2^2$$

$$\nabla f(\mathbf{x})=\nabla f(x_1,x_2)=\begin{pmatrix}1+4x_1+2x_2\\-1+2x_1+2x_2\end{pmatrix}$$

■ **단계 1 -** $\mathbf{x}^{(1)}$구하기

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})=\nabla f\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1+4x_1+2x_2\\-1+2x_1+2x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(1)}=\mathbf{x}^{(0)}-\alpha^{(0)}\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$$

$$=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}-\alpha\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\alpha\\\alpha\end{pmatrix}$$

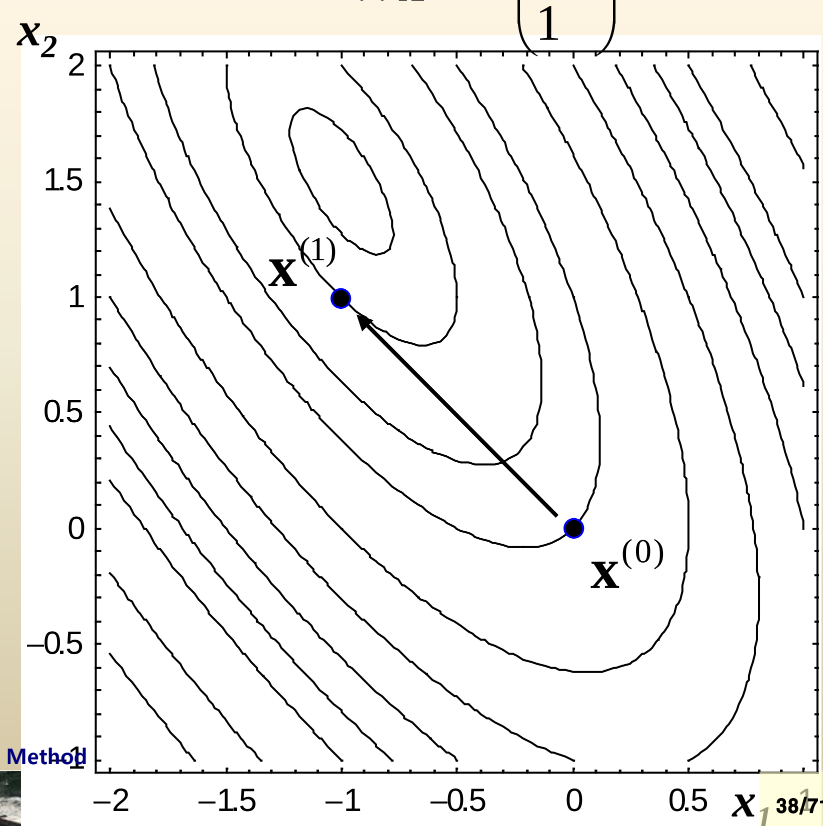
편의상 $\alpha^{(0)}$을 α로 대체함

$$f(\mathbf{x}^{(1)})=\alpha^2-2\alpha$$

함수 $f(\mathbf{x}^{(1)})$가 최소값을 가질 조건

$$\frac{df(\mathbf{x}^{(1)})}{d\alpha}=0\text{으로부터 }\alpha=1.0$$

$$\therefore\mathbf{x}^{(1)}=\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}$$



Unconstrained optimization problem
- Solution by Conjugate gradient method (2)

$$\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{c}^{(k)} + \beta_k \mathbf{d}^{(k-1)}$$

$$\beta_k = (\|\mathbf{c}^{(k)}\| / \|\mathbf{c}^{(k-1)}\|)^2$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$$

■ 단계 2 - $\mathbf{x}^{(2)}$구하기

$\mathbf{x}^{(1)}$에서 $\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})$를 구하고

"*Conjugate direction*"을 구한다.

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) = \nabla f\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 4x_1 + 2x_2 \\ -1 + 2x_1 + 2x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha^{(1)}[-\nabla f(\mathbf{x}^{(1)}) + \frac{|\nabla f(\mathbf{x}^{(1)})|^2}{|\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})|^2} \cdot \mathbf{d}^{(0)}]$$

로 가정하고 $f(\mathbf{x}^{(2)})$이 최소가 되는 $\alpha^{(1)}$를 구한다.

여기서, $\mathbf{d}^{(0)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$이다.

Unconstrained optimization problem
- Solution Using Conjugate gradient method (3)

$$\mathbf{x}^{(2)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha \left\{ -\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} + \frac{2}{2}(-1)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}$$

$$= \begin{pmatrix} -1 \\ 1+2\alpha \end{pmatrix}$$

편의상 $\alpha^{(1)}$을 α로 대체함

$$f(\mathbf{x}^{(2)}) = 4\alpha^2 - 2\alpha - 1$$

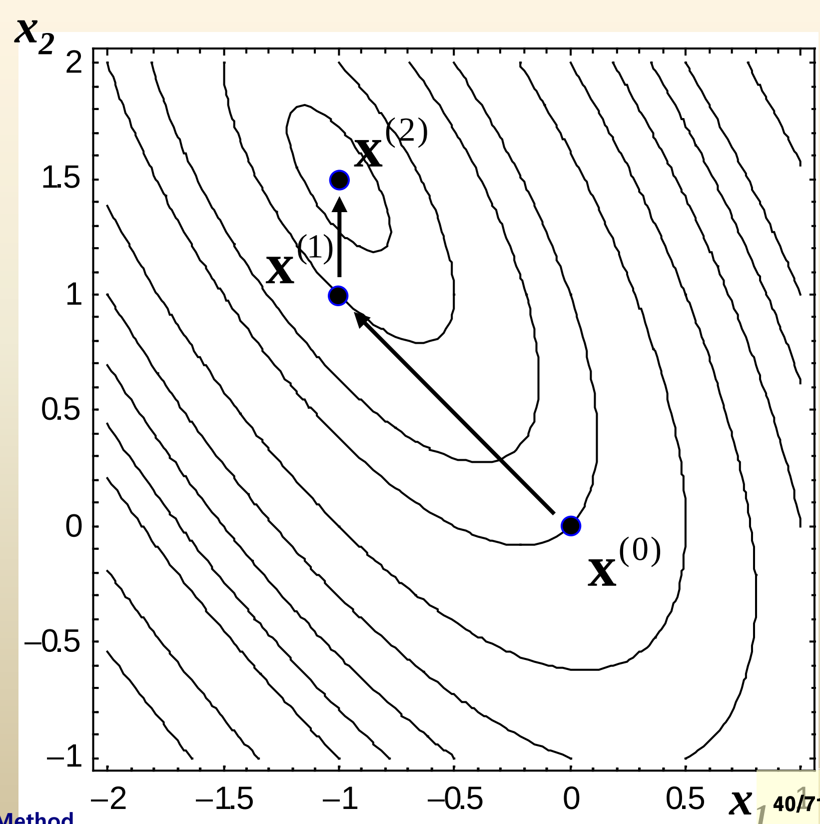
함수 $f(\mathbf{x}^{(2)})$가 최소값을 가질 조건

$\dfrac{df(\mathbf{x}^{(2)})}{d\alpha} = 0$으로부터 $\alpha = 0.25$

$$\therefore \mathbf{x}^{(2)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1.5 \end{pmatrix}$$

$\left\| \mathbf{c}^{(2)} \right\| = 0 \le \varepsilon$이므로

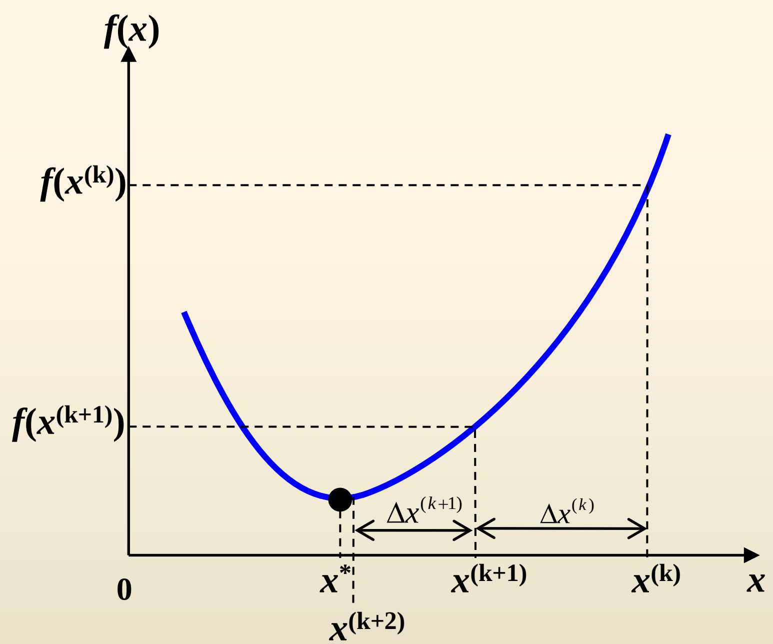
$\mathbf{x}^{(2)}$가 최적점이 된다.



$f(x)$를 최소화하는 점을 찾는 방법
- Newton's Method

Given $f(x)$

Find $f(x)$를 최소화하는 점 x^*



$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}$ 에서 함수값이 최소 되었다고 가정한다.

↓

현재의 설계점 $x^{(k)}$에서 테일러 전개 한다.

$$f(x^{(k)}+\Delta x^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \frac{\partial f(x^{(k)})}{\partial x}\Delta x^{(k)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(k)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(k)}\right)^2 + \cancel{O\left(\left(\Delta x^{(k)}\right)^3\right)}$$

↓

여기서 $x^{(k)}$는 상수이므로, $\Delta x^{(k)}$ 를 변수로 취급하여

$$f(x^{(k)}+\Delta x^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \frac{\partial f(x^{(k)})}{\partial x}\Delta x^{(k)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(k)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(k)}\right)^2$$

식을 $\Delta x^{(k)}$로 미분 한다.

$$\frac{df(x^{(k)}+\Delta x^{(k)})}{d\Delta x^{(k)}} = \frac{\partial f(x^{(k)})}{\partial x} + \frac{\partial^2 f(x^{(k)})}{\partial x^2}\Delta x^{(k)} = 0$$

→ 함수 f 가 최소 값을 가질 필요 조건

↓

$\Delta x^{(k)}$ 를 계산한다.

$$\Delta x^{(k)} = \left(-\frac{\partial f(x^{(k)})}{\partial x}\right) / \left(\frac{\partial^2 f(x^{(k)})}{\partial x^2}\right)$$

↓

| $\Delta x^{(k)}$ |< ε 를 만족 하는가?

NO → $k = k+1$ → (처음 단계로)

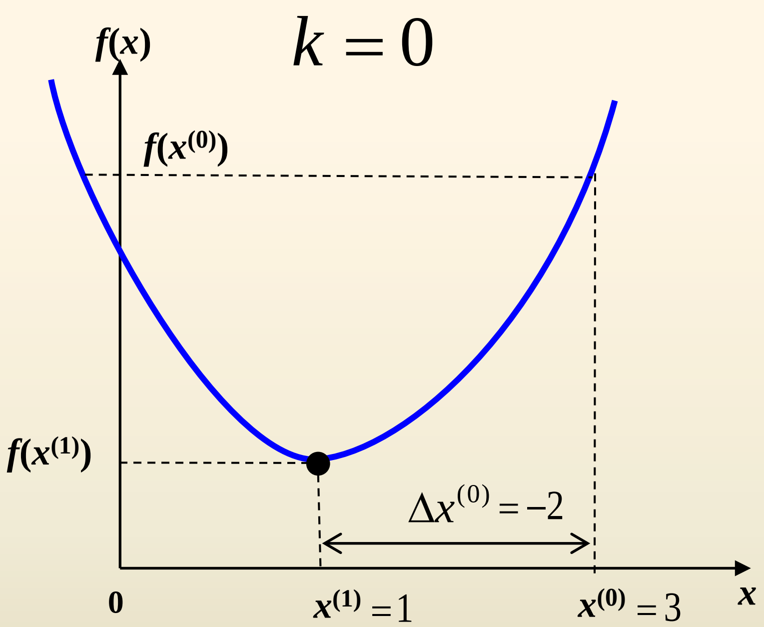
YES ↓

$x^* = x^{(k+1)}$ 로 두고 탐색 종료

$f(x)$를 최소화하는 점을 찾는 방법 - Newton's Method

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

Find $f(x)$를 최소화하는 점 x^*



$x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)}$ 에서 함수값이 최소 되었다고 가정한다.

현재의 설계점 $x^{(0)}$에서 테일러 전개 한다.

$$f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}) = f(x^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\Delta x^{(0)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}(\Delta x^{(0)})^2 + \cancel{O((\Delta x^{(0)}))^3}$$

여기서 $x^{(0)}$는 상수이므로, $\Delta x^{(0)}$ 를 변수로 취급하여

$$f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}) = f(x^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\Delta x^{(0)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}(\Delta x^{(0)})^2$$

식을 $\Delta x^{(0)}$ 로 미분 한다.

$$\frac{d\ f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)})}{d\,\Delta x^{(0)}} = \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x} + \frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\Delta x^{(0)} = 0$$

→ 함수 f 가 최소 값을 가질 필요 조건

$\Delta x^{(0)}$ 를 계산한다.

$$\Delta x^{(0)} = \left(-\frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\right) / \left(\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\right)$$

$$= (-2x+2)_{x=3} / (2)_{x=3} = -2$$

| $\Delta x^{(0)}$ |< ε 를 만족 하는가?

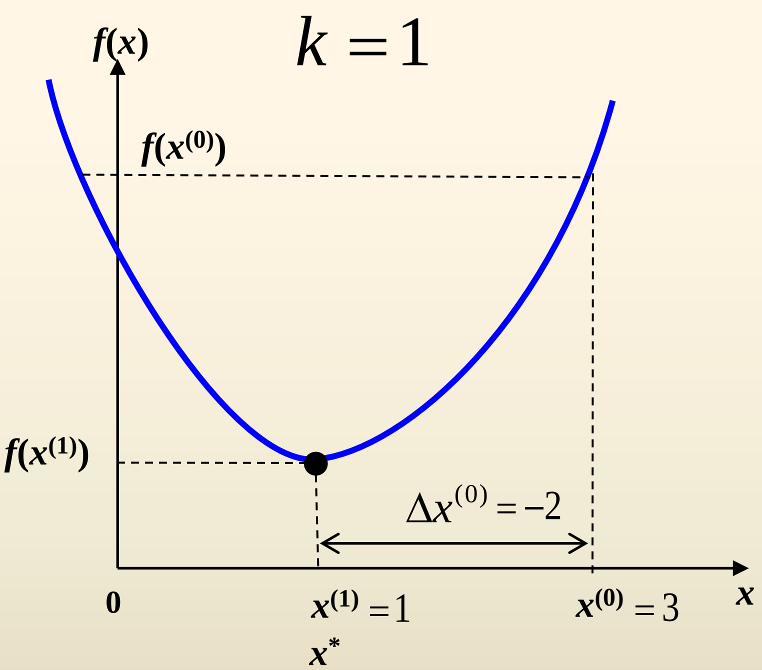
NO

$$k = k + 1$$
$$= 0 + 1 = 1$$

$f(x)$를 최소화하는 점을 찾는 방법
- Newton's Method

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

Find $f(x)$를 최소화하는 점 x^*



$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta x^{(1)}$ 에서 함수값이 최소 되었다고 가정한다.

현재의 설계점 $x^{(0)}$에서 테일러 전개 한다.

$$f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}) = f(x^{(1)}) + \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\Delta x^{(1)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(1)}\right)^2 + \cancel{O\left(\left(\Delta x^{(1)}\right)^3\right)}$$

여기서 $x^{(1)}$는 상수이므로, $\Delta x^{(1)}$ 를 변수로 취급하여

$$f(x^{(1)} + \Delta x^{(1)}) = f(x^{(1)}) + \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\Delta x^{(1)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(1)}\right)^2$$

식을 $\Delta x^{(1)}$ 로 미분 한다.

$$\frac{d\, f(x^{(1)} + \Delta x^{(1)})}{d\Delta x^{(1)}} = \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x} + \frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\Delta x^{(1)} = 0$$

→ 함수 f 가 최소 값을 가질 필요 조건

$\Delta x^{(1)}$ 를 계산한다.

$$\Delta x^{(1)} = \left(-\frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\right) / \left(\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\right)$$

$$= (-2x+2)_{x=1} / (2)_{x=1} = 0$$

$|\Delta x^{(1)}| < \varepsilon$ 를 만족 하는가?

YES

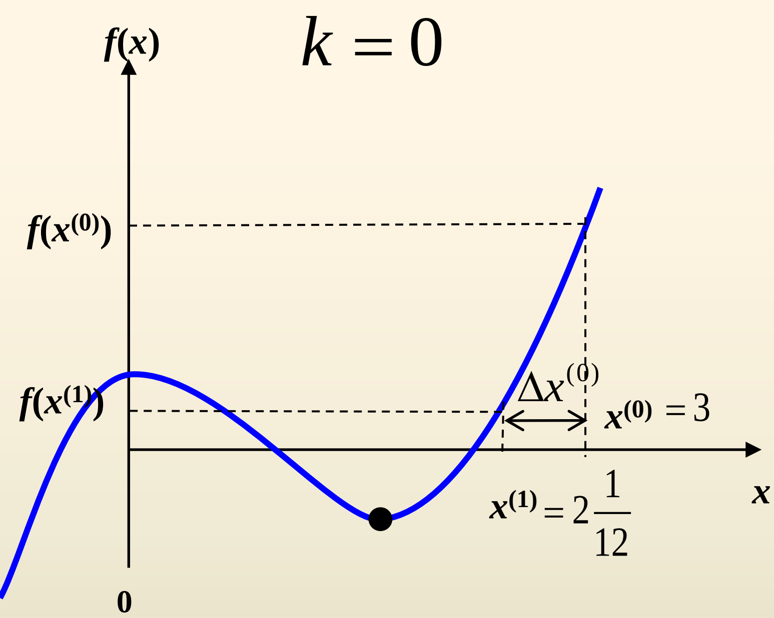
$x^* = x^{(1)}$ 로 두고 탐색 종료

3차식의 경우도 한번에 최소점을 찾을 수 있을까?

$f(x)$를 최소화하는 점을 찾는 방법 - Newton's Method

Given $f(x) = x^3 - 3x^2 + 2x$

Find $f(x)$를 최소화하는 점 x^*



$x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)}$ 에서 함수값이 최소 되었다고 가정한다.

현재의 설계점 $x^{(0)}$에서 테일러 전개 한다.

$$f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}) = f(x^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\Delta x^{(0)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(0)}\right)^2 + \cancel{O\left(\left(\Delta x^{(0)}\right)^3\right)}$$

여기서 $x^{(0)}$는 상수이므로, $\Delta x^{(0)}$ 를 변수로 취급하여

$$f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)}) = f(x^{(0)}) + \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\Delta x^{(0)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(0)}\right)^2$$

식을 $\Delta x^{(0)}$ 로 미분 한다.

$$\frac{d\, f(x^{(0)} + \Delta x^{(0)})}{d\Delta x^{(0)}} = \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x} + \frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\Delta x^{(0)} = 0 \rightarrow$$ 함수 f 가 최소 값을 가질 필요 조건

$\Delta x^{(0)}$ 를 계산한다.

$$\Delta x^{(0)} = \left(-\frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x}\right) / \left(\frac{\partial^2 f(x^{(0)})}{\partial x^2}\right)$$

$$= \left(-3x^2 + 6x - 2\right)_{x=3} / \left(6x - 6\right)_{x=3} = -\frac{11}{12}$$

| $\Delta x^{(0)}$ |< ε 를 만족 하는가?

NO

$k = k + 1$

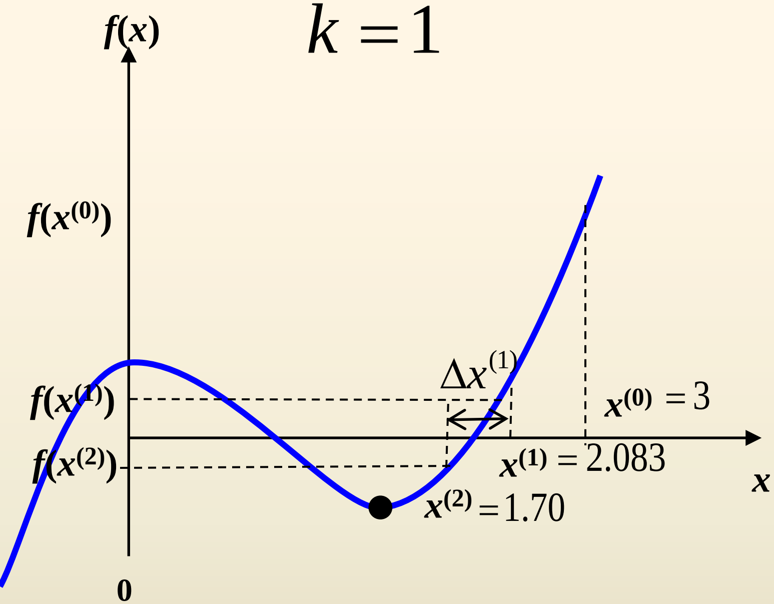
$= 0 + 1 = 1$

$f(x)$를 최소화하는 점을 찾는 방법
- Newton's Method

Given $f(x) = x^3 - 3x^2 + 2x$

Find $f(x)$를 최소화하는 점 x^*

$$k = 1$$



$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta x^{(1)}$ 에서 함수값이 최소 되었다고 가정한다.

↓

현재의 설계점 $x^{(1)}$에서 테일러 전개 한다.

$$f(x^{(1)} + \Delta x^{(1)}) = f(x^{(1)}) + \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\Delta x^{(1)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(1)}\right)^2 + \cancel{O\left(\left(\Delta x^{(1)}\right)^3\right)}$$

↓

여기서 $x^{(1)}$는 상수이므로, $\Delta x^{(1)}$ 를 변수로 취급하여

$$f(x^{(1)} + \Delta x^{(1)}) = f(x^{(1)}) + \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\Delta x^{(1)} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\left(\Delta x^{(1)}\right)^2$$

식을 $\Delta x^{(1)}$ 로 미분 한다.

$$\frac{d\ f(x^{(1)} + \Delta x^{(1)})}{d\Delta x^{(1)}} = \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x} + \frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\Delta x^{(1)} = 0$$

→ 함수 f 가 최소 값을 가질 필요 조건

↓

$\Delta x^{(1)}$를 계산한다.

$$\Delta x^{(1)} = \left(-\frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x}\right) / \left(\frac{\partial^2 f(x^{(1)})}{\partial x^2}\right)$$

$$= \left(-3x^2 + 6x - 2\right)_{x=\frac{25}{12}} / \left(6x - 6\right)_{x=\frac{25}{12}} = -0.388$$

↓

| $\Delta x^{(1)}$ |< ε 를 만족 하는가?

NO →

$$k = k + 1$$
$$= 1 + 1 = 2$$

왜 한번에 해를 찾지 못할까?

⇨ 테일러 전개를 하면서 3차 항을 무시하였기 때문에, 한번에 해를 찾지 못하고 반복계산이 필요하다.

Gradient method
- Newton's method

■ 헷세 행렬을 사용하여 탐색 방법을 개선한 방법

■ 단계 1 : 시작점 $\mathbf{x}^{(0)}$ 을 추정한다. 반복 회수 번호를 $k=0$ 으로 둔다. 그리고 종료 기준으로 허용치 ε 을 선정한다.

■ 단계 2 : $i=1$ 에서 n 까지 $c_i^{(k)} = \partial f(\mathbf{x}^{(k)}) / \partial x_i$ 를 계산한다.

■ 단계 3 : 헷세 행렬을 계산한다.

$$H(\mathbf{x}^{(k)}) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right], \qquad i=1,\cdots,n\,;\; j=1,\cdots,n$$

■ 단계 4 : 탐색 방향을 계산한다.

$$\mathbf{d}^{(k)} = \Delta\mathbf{x}^{(k)} = -\mathbf{H}^{-1}\mathbf{c}^{(k)}$$

$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \mathbf{c}^T \Delta\mathbf{x} + \frac{1}{2} \Delta\mathbf{x}^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\, \Delta\mathbf{x}$ 일 때

최소값을 가질 조건

$$df(\Delta\mathbf{x}) / d\Delta\mathbf{x} = \mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\Delta\mathbf{x} = 0$$

$$\Rightarrow \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\, \Delta\mathbf{x} = -\mathbf{c} \Rightarrow \; \Delta\mathbf{x} = -\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)^{-1}\mathbf{c}$$

Gradient method
- Newton's method

- 단계 5 : 설계점을 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)}$ 로 수정한다.
  2차식인 경우에는 한번에 탐색방향에서 최소인 점을 구할 수 있지만, 3차식 이상인 경우에는 한번에 찾을 수 없다. 따라서 α 를 도입하여, $f(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)})$ 를 최소화하도록 α 를 계산한다.
  α 를 계산하기 위해서는 어떠한 1차원 탐색법도 사용할 수 있다. 초기 이동 거리 추정으로 $\alpha = 1$ 로 가정한다.

- 단계 6 : $k = k + 1$ 로 두고 단계 2를 수행한다.

[ref] Taylor Series Expansion for function of two variables (1)

2변수 함수 $f(x_1, x_2)$ **에 대한 점** (x_1^*, x_2^*) **에서의 테일러 전개식**

$$f(x_1,x_2) = f(x_1^*,x_2^*) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_2 - x_2^*)$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1 - x_1^*)^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x_2 - x_2^*)^2\right) + R$$

⬇ 각 항을 다시 표현하면

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(x_2 - x_2^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 - x_1^* \\ x_2 - x_2^* \end{bmatrix} = \underline{\nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)}$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1 - x_1^*)^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x_2 - x_2^*)^2\right) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x_2 - x_2^*) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x_2 - x_2^*) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^* \\ x_2 - x_2^* \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{bmatrix} x_1 - x_1^* & x_2 - x_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - x_1^* \\ x_2 - x_2^* \end{bmatrix}$$

$$= \underline{\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)}$$

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \underline{\nabla f(\mathbf{x}^*)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)} + \underline{\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)} + R$$

$$\left(\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T,\ \mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*)^T,\ \boxed{\mathbf{H} \in M_{2\times 2}} \right)$$

2x2 Matrix의 원소

[ref] Taylor Series Expansion for function of two variables (2)

2변수 함수 $f(x_1, x_2)$ 에 대한 점 (x_1^*, x_2^*) 에서의 테일러 전개식(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

$$f(x_1,x_2) = f(x_1^*,x_2^*) + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}(x_1 - x_1^*) + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}(x_2 - x_2^*)$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}(x_1 - x_1^*)^2 + 2\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1 - x_1^*)(x_2 - x_2^*) + \frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}(x_2 - x_2^*)^2\right) \quad \cdots\cdots ①$$

$\mathbf{c} = \nabla f(\mathbf{x}^*)$, $\mathbf{d} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)$라 가정

$$\Rightarrow f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) = f(\mathbf{x}^*) + \mathbf{c}^T\mathbf{d} + \frac{1}{2}\mathbf{d}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\,\mathbf{d} \quad \cdots\cdots ②$$

식 ②를 x로 미분하면 어떤 형태의 Matrix로 표현 될까?

식①을 전개하면,

$$f(x_1,x_2) = f(x_1^*,x_2^*) + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1 - \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1^* + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2 - \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2^*$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}(x_1^2 - 2x_1x_1^* + x_1^{*2}) + 2\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}(x_1x_2 - x_1^*x_2 + x_1^*x_2^* - x_1x_2^*) + \frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}(x_2^2 - 2x_2x_2^* + x_2^{*2})\right) \cdots\cdots ③$$

식③을 전개하면,

$$f(x_1,x_2) = \boxed{f(x_1^*,x_2^*)} + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1 - \boxed{\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1^*} + \frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2 - \boxed{\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2^*}$$

$$+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1^2 - \frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1x_1^* + \boxed{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1^{*2}}$$

$$+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1x_2 - \frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1^*x_2 + \boxed{\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1^*x_2^*} - \frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1x_2^* \quad \cdots\cdots ④$$

$$+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2^2 - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2x_2^* + \boxed{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2^{*2}}$$

x^*는 상수 이므로
파란색 네모 안의 수는
모두 상수이다.

[ref] Taylor Series Expansion for function of two variables (3)

2변수 함수 $f(x_1, x_2)$에 대한 점 (x_1^*, x_2^*)에서의 테일러 전개식(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

$$f(x_1,x_2)= f(x_1^*,x_2^*)+\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}(x_1-x_1^*)+\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}(x_2-x_2^*)$$

$$+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}(x_1-x_1^*)^2+2\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1 \partial x_2}(x_1-x_1^*)(x_2-x_2^*)+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}(x_2-x_2^*)^2\right) \quad \cdots\cdots ①$$

$\mathbf{c}=\nabla f(\mathbf{x}^*)$, $\mathbf{d}=(\mathbf{x}-\mathbf{x}^*)$라 가정

$$\Rightarrow f(\mathbf{x})= f(\mathbf{x}^*)+\nabla f(\mathbf{x}^*)^T(\mathbf{x}-\mathbf{x}^*)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}^*)^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}-\mathbf{x}^*)= f(\mathbf{x}^*)+\mathbf{c}^T\mathbf{d}+\frac{1}{2}\mathbf{d}^T\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)\,\mathbf{d} \quad \cdots\cdots ②$$

식 ②를 x로 미분하면 어떤 형태의 Matrix로 표현 될까?

$$f(x_1,x_2)=\boxed{f(x_1^*,x_2^*)}+\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1-\boxed{\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}x_1^*}+\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2-\boxed{\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}x_2^*}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1^2-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1x_1^*+\boxed{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1^{*2}}$$

$$+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1x_2-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1x_2^*+\boxed{\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1^*x_2^*}-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1^*x_2+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2^2-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2x_2^*+\boxed{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2^{*2}} \quad \cdots ④$$

식④를 x_1과 x_2로 각각 미분(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

x^*는 상수 이므로 **파란색 네모** 안의 수는 모두 상수이다.

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}=\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}x_1^*+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_2-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_2^*$$

$$=\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1}+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1^2}(x_1-x_1^*)+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}(x_2-x_2^*)$$

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}=\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}x_2^*+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1-\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}x_1^*$$

$$=\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2}+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_2^2}(x_2-x_2^*)+\frac{\partial^2 f(x_1^*,x_2^*)}{\partial x_1\partial x_2}(x_1-x_1^*)$$

[ref] Taylor Series Expansion for function of two variables (4)

2변수 함수 에 대한 점 에서의 테일러 전개식(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

…… ①

라 가정

…… ②

식 ②를 x로 미분하면 어떤 형태의 Matrix로 표현 될까?

라 가정

[ref] Taylor Series Expansion for function of two variables (5)

2변수 함수 에 대한 점 에서의 테일러 전개식(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

...... ①

라 가정

...... ②

식 ②를 d로 미분하면 어떤 형태의 Matrix로 표현 될까?

식 ①을 d_1과 d_2로 각각 미분(3차 이상의 고차항은 무시할 경우)

Chain rule에 의해

양면을 d_1으로 미분

양면을 d_2로 미분

식 ②를 d로 미분한 결과는 x로 미분한 결과와 같다.

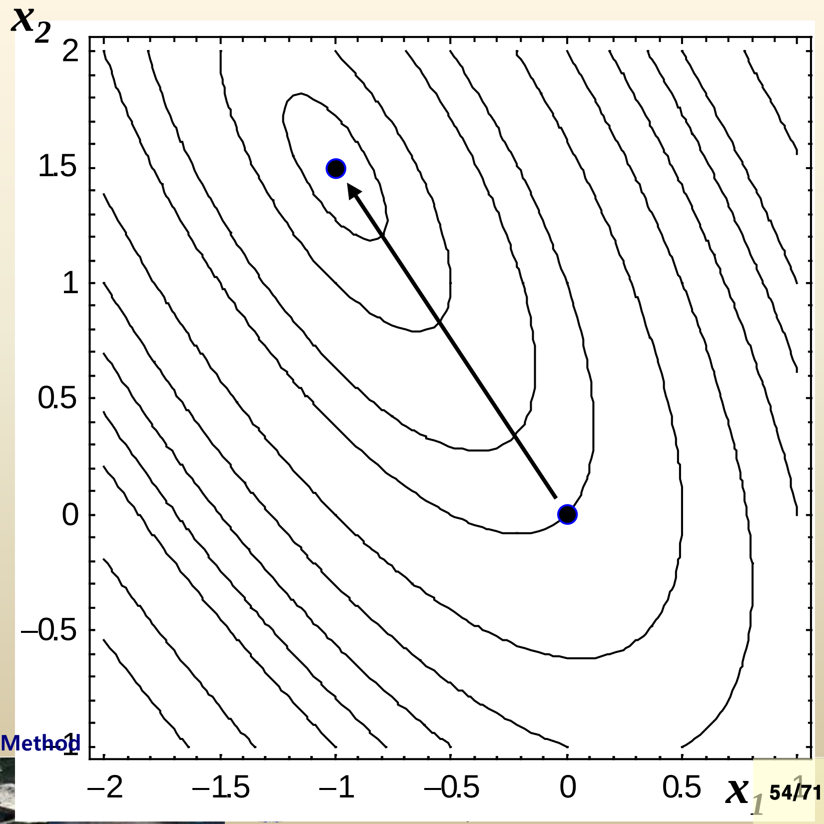
라 가정

Unconstrained optimization problem
- Solution by Newton' method (1)

Minimize

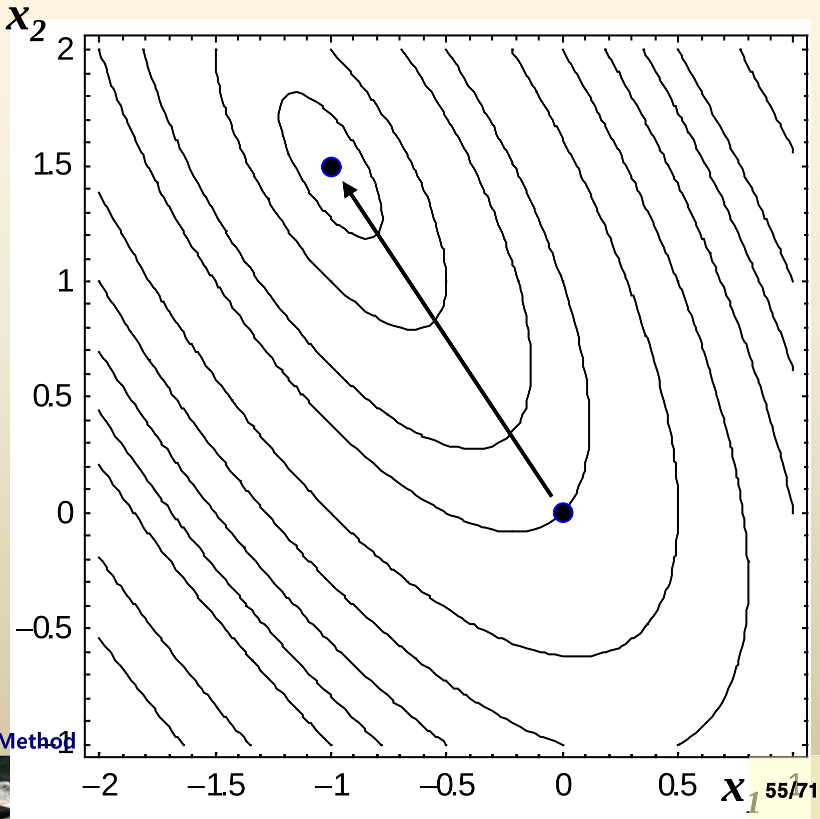
- 단계 1 -

Unconstrained optimization problem - Solution by Newton' method(2)



Unconstrained optimization problem
- Solution by Newton' method(3)

- 단계 2 -



Gradient method
- Newton method

The Newton method is not very useful in practice, due to following features of the method

1. It requires the storing of the n×n matrix
2. It becomes very difficult and sometimes, impossible to compute the elements of the matrix
3. It requires the inversion of the matrix at each step
4. It requires the evaluation of the quantity at each step

Gradient method
- Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method(1/3)

■ 1차 미분만을 이용하여 의 <u>역 헷세 행렬을 근사적으로 계산하는 방법</u>

- ■ 단계 1 : 시작점 를 추정한다.
  목적 함수의 역 헷세 행렬을 근사적으로 추정하기 위해 대칭의 양정 행렬 을 선정한다. 처음 시작할 때는 를 선택할 수 있다. 수렴 매개 변수 을 정하고, 이라 두고 Gradient 벡터를 다음과 같이 계산한다.

- ■ 단계 2 : Gradient 벡터의 Norm 를 계산한다.
  만일 이면 반복 과정을 멈추고 그렇지 않으면 다음 단계로 계속 진행한다. 이 방법의 첫 단계는 최속 강하법과 같다. 즉, 첫 단계에서는 단계 4로 간다.

Gradient method
- Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method(2/3)

■ 단계 3 : 탐색 방향을 다음과 같이 계산한다.

즉, Newton 방법의 을 근사적으로 로 대체한다.

■ 단계 4 : 를 최소화하는 이동 거리
를 계산한다.

■ 단계 5 : 설계점을 로 수정한다.

■ 단계 6 : 목적 함수의 근사적 역 헷세 행렬 를 다음과 같이 보정한다.

행렬

여기서, 보정 행렬 는 다음과 같이 계산한다.

행렬

행렬

벡터

벡터

벡터

행렬 벡터 행렬

■ 단계 7 : 로 두고 단계 2를 수행한다.

- Derivation of Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method

Using Taylor series,

Use to approximate

Subtracting two equation yields

Where,

Where, denote an approximation to the inverse of the Hessian matrix

Gradient method
- Derivation of Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method

Using Taylor series,

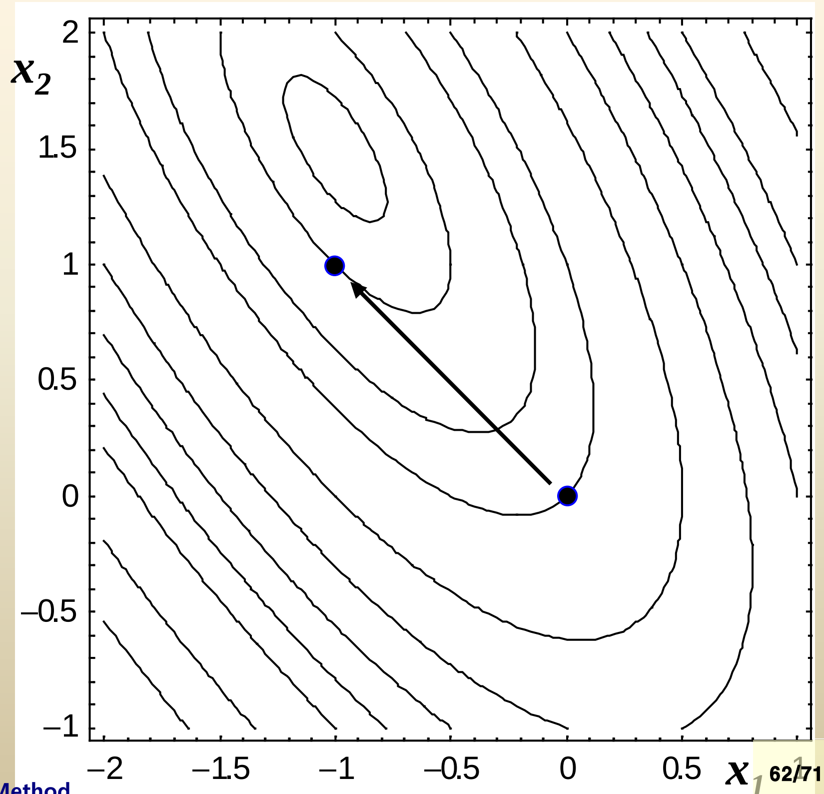
Use to approximate

Where,

the symmetry and positive definiteness of the matrix are maintained
=> Candidate optimum point condition(후보 최적성 조건)

Unconstrained optimization problem
- Solution by Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method(1)

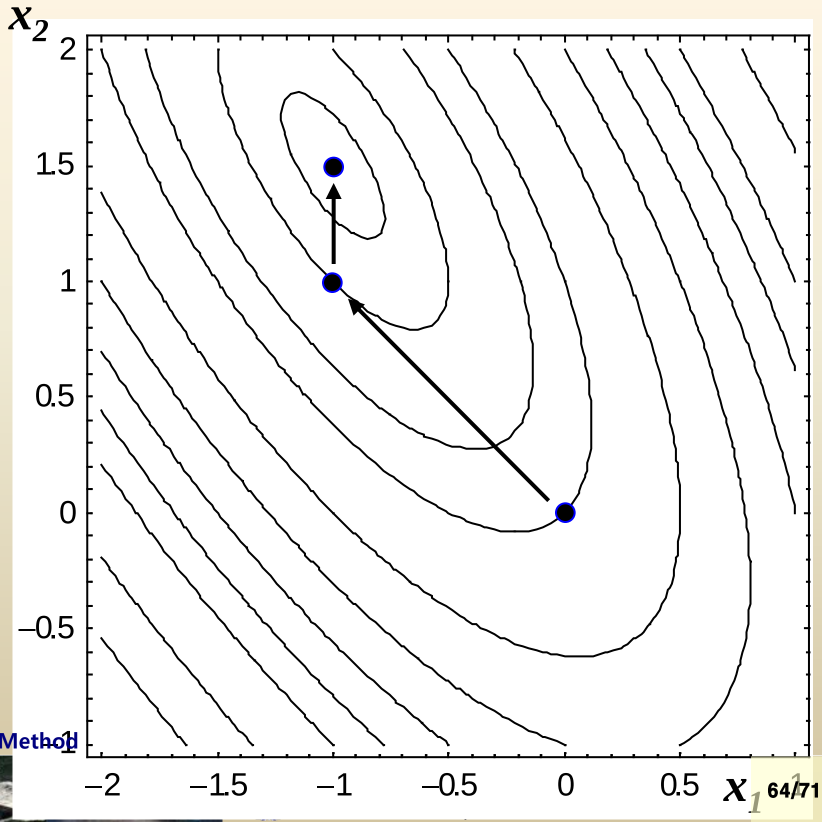
■ 단계 1 -



Unconstrained optimization problem
- Solution by Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method(2)

Unconstrained optimization problem
- Solution by Davidon-Fletcher-Powell(DFP) method(3)

■ 단계 2 -



Gradient method
- Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method(1/3)

- DFP 방법은 매 반복 단계에서 역 헷세 행렬을 근사적으로 계산하는데 비해, BFGS 방법은 헷세 행렬을 수정하는 방법

  - 단계 1 : 시작점 을 추정한다.
    목적 함수의 헷세 행렬을 근사적으로 추정하기 위하여 대칭의 양정 행렬 를 선정한다. 처음 시작할 때는 를 선택할 수 있다. 수렴 매개 변수 을 정하고, 이라 두고 Gradient 벡터를 계산한다.

  - 단계 2 : Gradient 벡터의 Norm 를 계산한다.
    이면 반복 과정을 멈추고 아니면 다음 단계를 수행한다.

Gradient method
- Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method(2/3)

■ 단계 3 : 탐색 방향 를 구하기 위해 다음의 선형 방정식을 푼다.

수학적으로는 Newton 방법의 와 같으나 실제로는 를 근사적으로 보정한다.

■ 단계 4 : 를 최소화 하는 이동 거리 를 계산한다.

■ 단계 5 : 설계점을 로 수정한다.

Gradient method
- Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method(3/3)

■ 단계 6 : 목적 함수의 근사적 헷세 행렬 를 다음과 같이 보정한다.

행렬

여기서, 보정 행렬 와 는 다음과 같이 계산한다.

; 설계점의 변화

; 경사도의 변화

■ 단계 7 : 로 두고 단계 2를 수행한다.

Gradient method
- Derivation of Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method

Using Taylor series,

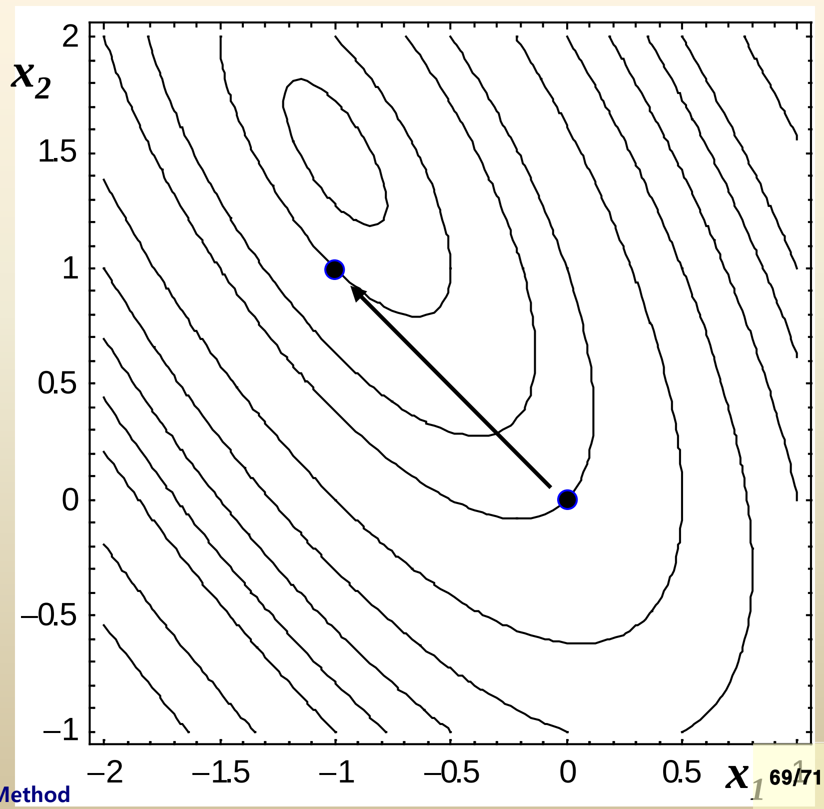
Let

Use to approximate

Where,

Unconstrained optimization problem
- Solution by Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method(1)

- 단계 1 -



Unconstrained optimization problem
- Solution by Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) method(2)

■ 단계 2 -