Calcul Numeric

Cursul 13

2017

Anca Ignat

Optimizare numerică

$$\min \{ f(x) ;\ x \in \mathbb{R}^n \} ,\ f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numeşte **punct de minim global** pentru funcţia f dacă $f(x^*) \le f(x)\ \ \forall x \in \mathbb{R}^n$.

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numeşte **punct de minim local** pentru funcţia f dacă există o vecinătate V a punctului x^* pentru care $f(x^*) \le f(x)\ \ \forall x \in V$.

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numeşte **punct de minim strict local** pentru funcţia f dacă există o vecinătate V a punctului x^* pentru care $f(x^*) < f(x)\ \ \forall x \in V,\ x \ne x^*$.

$$V = S(x^*, r) = \left\{ x \in \mathbb{R}^n ; \left\| x - x^* \right\| \le r \right\}.$$

Dacă funcţia $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ se numeşte **gradient** al funcţiei f în punctul x vectorul:

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

Dacă funcţia $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ se numeşte **matrice hessiană** a funcţiei f în punctul x matricea:

$$\nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{i,j=1,\ldots,n}$$

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

Teorema lui Taylor

Dacă funcţia $\boldsymbol{f \in C^1(\mathbb{R}^n)}$ este continuu diferenţiabilă atunci există $\boldsymbol{t \in (0,1)}$ astfel ca:

$$\boldsymbol{f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p}. \qquad \textbf{(1)}$$

Dacă $\boldsymbol{f \in C^2(\mathbb{R}^n)}$ este de două ori continuu diferenţiabilă atunci există $\boldsymbol{t \in (0,1)}$ astfel ca:

$$\boldsymbol{f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p}. \quad \textbf{(2)}$$

Teorema 1 (condiţii necesare de optim de ordinul întâi)

Fie $\boldsymbol{f} \in \boldsymbol{C}^1(\mathbb{R}^n)$ şi $\boldsymbol{x^*} \in \mathbb{R}^n$ un punct de minim local pentru $\boldsymbol{f}$. Atunci $\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*}) = \mathbf{0}$.

Demonstraţie: Presupunem prin reducere la absurd că $\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*}) \neq \mathbf{0}$. Fie $\boldsymbol{p} = -\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*})$. Avem:

$$\boldsymbol{p}^T \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*}) = -\left\|\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*})\right\| < \mathbf{0}.$$

Deoarece $\nabla \boldsymbol{f}$ este continuă în vecinătatea lui $\boldsymbol{x^*}$, există $\boldsymbol{T > 0}$ astfel ca:

$$\boldsymbol{p}^T \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{tp}) < \mathbf{0} \quad , \quad \forall \boldsymbol{t} \in \left[\mathbf{0}, \boldsymbol{T}\right].$$

Pentru orice $\boldsymbol{s} \in (\mathbf{0}, \boldsymbol{T}]$, din Teorema lui Taylor avem:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*} + \boldsymbol{sp}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*}) + \boldsymbol{sp}^T \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x^*} + \boldsymbol{tp}) \ , \ \textbf{pentru un } \boldsymbol{t} \in (\mathbf{0}, \boldsymbol{s}).$$

Prin urmare $\boldsymbol{f(x^* + sp) < f(x^*)}$ $\forall \boldsymbol{s} \in \boldsymbol{(0,T]}$, ceea ce implică faptul că $\boldsymbol{x^*}$ nu este punct de minim local.

Un punct $\boldsymbol{x^*}$ pentru care $\nabla \boldsymbol{f(x^*) = 0}$ se numeşte **punct staţionar**. Teorema de mai sus spune că orice punct de minim local trebuie să fie punct staţionar.

Teorema 2 (condiţii necesare de optim de ordinul al doilea)

Fie $\boldsymbol{f} \in \boldsymbol{C}^2(\mathbb{R}^{\boldsymbol{n}})$ şi $\boldsymbol{x^*} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$ un punct de minim local pentru ***f***. Atunci $\nabla \boldsymbol{f(x^*) = 0}$ şi matricea hessiană $\nabla^2 \boldsymbol{f(x^*)}$ este pozitiv semidefinită.

O matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ este **pozitiv semidefinită** dacă

$$\left(Ax, x\right)_{\mathbb{R}^n} \geq 0 \ \ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

şi este **pozitiv definită** dacă

$$\left(Ax, x\right)_{\mathbb{R}^n} > 0 \ \ \forall x \in \mathbb{R}^n,\ x \neq 0.$$

Demonstraţie: Din Teorema 1 rezultă că $\nabla f(x^*) = 0$. Presupunem prin reducere la absurd că matricea hessiană în x^* nu este pozitiv semidefinită, adică există un vector p pentru care $p^T \nabla^2 f(x^*) p < 0$ şi deorece matricea hessiană este continuă avem $p^T \nabla^2 f(x^* + tp) p < 0 \ \ \forall t \in [0, T]$. Folosind relaţia (2) din Teorema lui Taylor, avem $\forall s \in (0, T]$:

$$f(x^* + sp) = f(x^*) + s\nabla f(x^*)^T p + \frac{1}{2} s^2 p^T \nabla^2 f(x + tp) p < f(x^*).$$

Teorema 3 (condiţii suficiente de ordinul al doilea)

Fie $\boldsymbol{f \in C^2(\mathbb{R}^n)}$ şi $\boldsymbol{x^* \in \mathbb{R}^n}$ un punct pentru care $\boldsymbol{\nabla f(x^*) = 0}$ şi matricea hessiană $\boldsymbol{\nabla^2 f(x^*)}$ este pozitiv definită. Atunci $\boldsymbol{x^*}$ este punct de minim strict local pentru $\boldsymbol{f}$.

Demonstraţie: Deoarece $\boldsymbol{\nabla^2 f}$ este continuă matricea hessiană este pozitiv definită într-o vecinătate $\boldsymbol{V = S(x^*, r)}$ a punctului $\boldsymbol{x^*}$. Fie $\boldsymbol{p \neq 0}$ **cu** $\boldsymbol{\|p\| < r}$ atunci $\boldsymbol{x^* + p \in V}$ şi:

$$\boldsymbol{f(x^* + p) = f(x^*) + \nabla f(x^*)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp) p}$$

$$\boldsymbol{= f(x^*) + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x^* + tp) p \quad , \quad t \in (0,1)}$$

de unde deducem că:

$$f(x^*) < f(x^* + p)\ \forall p\ ,\ \| p \| < r,\ p \neq 0$$

O funcţie f se numeşte **convexă** dacă:

$$f\left(a\,x_1 + (1-a)x_2\right) \leq af(x_1) + (1-a)f(x_2)\ \ ,\forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n, \forall a \in [0,1].$$

Teorema

Dacă f este funcţie convexă orice punct de minim local este punct de minim global. Dacă în plus $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ atunci orice punct staţionar este punct de minim global.

Metode de descreştere

Se numeşte **direcţie de descreştere** a funcţiei $\boldsymbol{f}$ în punctul $\boldsymbol{x}$ un vector $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^n$ pentru care

$$f(x+\alpha d) \leq f(x) \quad , \ \forall \alpha \in [0, \overline{\alpha}).$$

Teorema

Fie $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$. Un vector $\boldsymbol{d}$ este direcţie de descreştere pentru $\boldsymbol{f}$ în $\boldsymbol{x}$ dacă şi numai dacă:

$$\nabla f(x)^T d = \left(d, \nabla f(x)\right)_{\mathbb{R}^n} < 0.$$

Algoritm de descreştere

1. alege $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$
2. do
   - găseşte o direcţie de descreştere $\boldsymbol{d}$ a lui $\boldsymbol{f}$ în $\boldsymbol{x}$
   - găseşte $\tilde{\boldsymbol{\alpha}} > \mathbf{0}$ astfel ca

     $$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}+\tilde{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{d}) = \mathbf{min}\{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{d});\ \boldsymbol{\alpha} \in (\mathbf{0},\overline{\boldsymbol{\alpha}})\}$$

     (ajustarea pasului – line search)
   - $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}+\tilde{\boldsymbol{\alpha}}\boldsymbol{d}$

   while (nu am găsit soluţia)

Ajustarea pasului (line search)

Trebuie rezolvată o problemă de minimizare unidimensională

$$\min\{g(a)\ ;\ a \in [b,c]\}$$

Metoda Newton

Fie a_k aproximarea curentă a soluţiei problemei de minimizare de mai sus. Vom folosi dezvoltarea în serie Taylor a funcţiei g

$$g(a) = g(a_k) + g'(a_k)(a - a_k) + \frac{1}{2} g''(a_k)(a - a_k)^2 + \frac{1}{3!} g'''(b_k)(a - a_k)^3$$

$$q(a) = g(a_k) + g'(a_k)(a - a_k) + \frac{1}{2} g''(a_k)(a - a_k)^2$$

Pentru $a \approx a_k$ putem considera că funcţia q aproximează funcţia g, $q(a) \approx g(a)$ şi

$$\min\{g(a)\ ;\ a \in [c,b]\} \simeq \min\{q(a)\ ;\ a \in [c,b]\}.$$

Construim elementul a_{k+1} ca fiind soluţia problemei:

$$q(a_{k+1}) = \min\{q(a)\ ;\ a \in [c,b]\}$$

a_{k+1} este soluţia ecuaţiei

$$q'(a) = 0 \iff q'(a) = g'(a_k) + g''(a_k)(a - a_k) \Rightarrow \boxed{a_{k+1} = a_k - \frac{g'(a_k)}{g''(a_k)}}$$

Metoda secantei

Dacă în relaţiile de mai sus se face următoarea aproximare:

$$g''(a_k) \approx \frac{g'(a_k) - g'(a_{k-1})}{a_k - a_{k-1}}$$

obţinem următoarea metodă de aproximare, numită şi metoda secantei:

$$\boxed{a_{k+1} = a_k - g'(a_k)\frac{a_k - a_{k-1}}{g'(a_k) - g'(a_{k-1})}}$$

Aproximare spline cubică

Vom folosi pentru a construi a_{k+1} pe a_{k-1} , a_k , $g(a_{k-1})$, $g(a_k)$, $g'(a_{k-1})$, $g'(a_k)$. Aproximăm funcţia g cu un polinom de grad 3

$$g(a) \approx q(a) = c_0 a^3 + c_1 a^2 + c_2 a + c_3$$

Funcţia q (respectiv constantele c_i) se calculează a.î.

$$q(a_{k-1}) = g(a_{k-1}) \quad , \quad q(a_k) = g(a_k)$$
$$q'(a_{k-1}) = g'(a_{k-1}) \quad , \quad q'(a_k) = g'(a_k)$$

a_{k+1} este punctul de minim al funcţiei q

$$a_{k+1} = a_k - (a_k - a_{k-1})\left[\frac{g'(a_k) + u_2 - u_1}{g'(a_k) - g'(a_{k-1}) + 2u_2}\right]$$

$$u_1 = g'(a_{k-1}) + g'(a_k) - 3\frac{g(a_k) - g(a_{k-1})}{a_k - a_{k-1}}$$

$$u_2 = \sqrt{u_1^2 - g'(a_{k-1})g'(a_k)}$$

Ajustarea inexactă a pasului

$$f(x+\tilde{\alpha}d) \cong \min\{f(x+\alpha d);\ \alpha \in (0,\bar{\alpha})\}$$

- nu se obţine $\tilde{\alpha}$ optimal
- pentru reducerea timpului de calcul optimizarea se opreşte înainte de a ajunge la soluţie, în funcţie de anumite criterii/teste de oprire

Regula lui Armijo

$$g(a) = f(x_k + a\,d_k) \quad , \quad \bar{g}(a) = g(0) + \varepsilon a\, g'(0) \; , \; \varepsilon \in (0,1)$$

$\bar{a}$ este acceptabil după regula lui Armijo dacă

$$(1) \qquad g(\bar{a}) \le \bar{g}(\bar{a})$$

$$(2) \qquad g(\sigma\bar{a}) \ge \bar{g}(\sigma\bar{a})$$

$k = 0;$

se alege a_0

while $(\, g(a_k) > \bar{g}(a_k)\,)$

- $a_{k+1} = \dfrac{1}{\sigma} a_k$
- $k = k + 1$ $\qquad (\sigma = 2$ **sau** $10 \quad , \quad \varepsilon = 0.2)$

Testul Goldstein

Dat $\varepsilon \in (0,2), \bar{\alpha}$ este considerat acceptabil dacă:

$$g(\bar{\alpha}) \le \bar{g}(\bar{\alpha}) \;\; \text{si} \;\; g(\bar{\alpha}) > g(0) + (1-\varepsilon) g'(0)$$

$$x_{k+1} = x_k + \bar{\alpha} d_k$$

$\bar{\alpha}$ este acceptat dacă

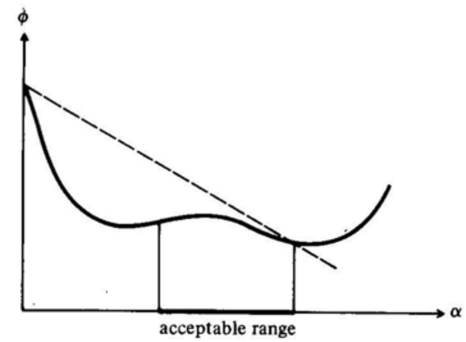
$$\varepsilon \le \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{\alpha \nabla f(x_k) d_k} \le 1 - \varepsilon$$

Testul Wolfe

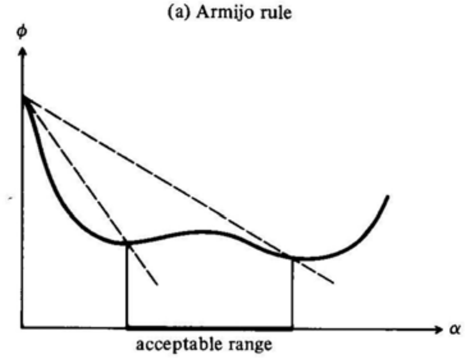
$\varepsilon \in (0,2)$

$$\bar{\alpha}: \quad g(\bar{\alpha}) \le \bar{g}(\bar{\alpha}) = g(0) + \varepsilon \bar{\alpha} g'(0)$$

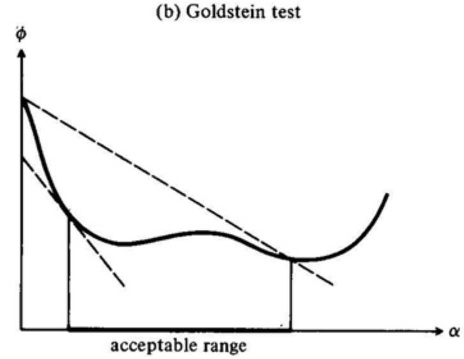
$$g'(\bar{\alpha}) \ge (1-\varepsilon) g'(0)$$



(a) Armijo rule



(b) Goldstein test



(c) Wolfe test

Metoda pantei maxime

$$\min\{\, f(x)\,;\, x \in \mathbb{R}^n \,\}\ ,\quad f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

x_0 dat , $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $k = 0,1,\ldots$

d_k direcţie de descreştere a lui f în x_k

$$\alpha_k > 0\ f(x_k + \alpha_k d_k) = \min\{f(x_k + \alpha\, d_k)\,;\ \alpha \in [0,\overline{\alpha}]\}$$

d_k direcţie de descreştere dacă :

$$\nabla f(x_k)^T d_k < 0.$$

Metoda pantei maxime:

$$d_k = -\nabla f(x_k)$$

Cazul pătratic:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b = \frac{1}{2}\left(Ax, x\right)_{\mathbb{R}^n} - \left(b, x\right)_{\mathbb{R}^n}$$

$b \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrică şi pozitiv definită

A pozitiv definită $\rightarrow$ **det** $A \neq 0$, f este strict convexă

$$\nabla f(x) = Ax - b \quad , \quad \nabla^2 f(x) = A$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{min}\{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x});\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n\}\ \boldsymbol{x}^* \text{punct unic de minim} \Leftrightarrow$$

$\boldsymbol{x}^*$ soluţia sistemului liniar $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{\alpha}_k \boldsymbol{g}_k \ , \quad \boldsymbol{g}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_k = \mathbf{arg\,min}\{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{\alpha}\ \boldsymbol{g}_k)\ ;\ \boldsymbol{\alpha} \in [\mathbf{0}, \overline{\boldsymbol{\alpha}}]\}$$

$$f(x_k - \alpha g_k) = \frac{1}{2}(x_k - \alpha g_k)^T A(x_k - \alpha g_k) - (x_k - \alpha g_k)^T b =$$

$$= \frac{1}{2}\left(g_k^T A g_k\right)\alpha^2 - \left(g_k^T A x_k - g_k^T b\right)\alpha + f(x_k) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(g_k^T A g_k\right)\alpha^2 - \left(g_k^T g_k\right)\alpha + f(x_k)$$

$f(x_k - \alpha g_k)$ ecuaţie de gr. 2 în α, coef. lui $\alpha^2, g_k^T A g_k > 0$

$$\alpha_{\min} = \alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k}$$

Metoda pantei maxime pentru funcţionale pătratice:

$$\boldsymbol{x}_0 \ - \text{dat}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \left(\frac{\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{g}_k}{\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{g}_k} \right) \boldsymbol{g}_k \quad , \quad \boldsymbol{k} = \mathbf{0,1,...}$$

$$\boldsymbol{g}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{*T} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*$$

$$\nabla \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})$$

Şirul construit cu metoda pantei maxime satisface:

$$E(x_{k+1}) = \left[1 - \frac{\left(g_k^T g_k\right)^2}{\left(g_k^T A g_k\right)\left(g_k^T A^{-1} g_k\right)} \right] E(x_k)$$

Inegalitatea lui Kantorovich

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A = A^T$, $A > 0$ pozitiv definită

$$\frac{\left(x^T x\right)^2}{\left(x^T A x\right)\left(x^T A^{-1} x\right)} \geq \frac{4cC}{(c + C)^2}$$

c, C - cea mai mica şi cea mai mare valoare proprie a lui A.

Teoremă

Cazul pătratic: Pentru orice iteraţie iniţială $\boldsymbol{x_0}$, şirul construit cu metoda pantei maxime converge la $\boldsymbol{x^*}$ unicul punct de minim al funcţiei $\boldsymbol{f}$. Avem:

$$\boldsymbol{E(x_{k+1}) \le \left(\frac{C-c}{C+c}\right)^2 E(x_k)}$$

Cazul general: $\boldsymbol{f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ f \in C^2(\mathbb{R}^n),}$ $\boldsymbol{f}$ are un punct de minim local $\boldsymbol{x^*}$. Presupunem că $\boldsymbol{F(x^*) = \nabla^2 f(x^*)}$ are $\boldsymbol{c > 0}$ cea mai mică valoare proprie şi $\boldsymbol{C > 0}$ cea mai mare valoare proprie. Dacă şirul $\boldsymbol{\{x_k\}}$ construit cu metoda pantei maxime converge la $\boldsymbol{x^*}$ (la fiecare pas $\boldsymbol{A = \nabla^2 f(x_k)}$, $\boldsymbol{b = \nabla f(x_k)}$), $\boldsymbol{x_k \to x^*}$ atunci $\boldsymbol{f(x_k) \to f(x^*)}$ converge liniar cu o rată de convergenţă $\le \boldsymbol{\left(\frac{C-c}{C+c}\right)^2}$.

Metoda Newton

x_k - punctul curent de aproximare

$$f(x) \simeq f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(x - x_k) = g(y)$$

g – funcţională pătratică, $y = x - x_k$,

$$g(y) = \frac{1}{2} y^T A y - y^T b + c$$

$$A = \nabla^2 f(x_k) \quad , \quad b = -\nabla f(x_k) \quad , \quad c = f(x_k)$$

$y^* = \arg\min\{g(y);\ y \in \mathbb{R}^n\}$ este unica soluţie a sistemului liniar $Ay = b$, $y^* = A^{-1}b = -\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)$

Metoda Newton

$$x_{k+1} = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)\,,\ k = 0,1,\dots\ ,\ x_0 \text{ - dat}$$

Teoremă

Fie $f \in C^3(\mathbb{R}^n)$ care are un punct de minim local x^* astfel ca matricea $\nabla^2 f(x^*) > 0$ este pozitiv definită. Dacă punctul de început x_0 este suficient de aproape de x^*, $\| x - x^* \| \le r$, atunci şirul $\{x_k\}$ generat cu metoda lui Newton converge la x^* şi ordinul de convergenţă este cel puţin 2.

Variante ale metodei lui Newton

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)\ ,\ k = 0,1,...$$

α_k se alege astfel ca :

$$f(x_{k+1}) = \min\{f(x_k - \alpha\left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k));\ \alpha \in [0,\bar{\alpha}]\}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha M_k g_k\ ,\ \alpha > 0\ ,\ M_k \in \mathbb{R}^{n\times n}\ ,\ g_k = \nabla f(x_k)$$

$$M_k = I_n \ \forall k \ - \text{ panta maximă}$$

$$M_k = \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} - \text{ metoda Newton}$$

Cum alegem M_k? $d_k = -M_k g_k$ direcţie de descreştere

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x_{k+1} - x_k) + O(\| x_{k+1} - x_k \|^2)$$

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) - \alpha g_k^T M_k g_k + O(\alpha^2)$$

$$f(x_{k+1}) < f(x_k), \ \alpha > 0 \ \Rightarrow g_k^T M_k g_k > 0$$

Luăm $\boldsymbol{M_k > 0}$ pozitiv definită

$$\boldsymbol{M_k = \left[\varepsilon_k I_n + \nabla^2 f(x_k)\right]^{-1}} \quad , \quad \boldsymbol{\varepsilon_k > 0}$$

Întotdeauna există $\boldsymbol{\varepsilon_k > 0}$ astfel ca matricea $\boldsymbol{M_k > 0}$ să fie pozitiv definită.

- Fie $\boldsymbol{F_k = \nabla^2 f(x_k)}$ şi $\boldsymbol{\delta > 0}$ constantă fixată.

- Se calculează valorile proprii ale matricii $\boldsymbol{F_k : \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n}$

- Se alege $\boldsymbol{\varepsilon_k \geq 0}$ cea mai mică constantă nenegativă pentru care matricea $\boldsymbol{\varepsilon_k I_n + F_k}$ are valorile proprii $\geq \boldsymbol{\delta}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon_k \geq 0 \;\; \& \;\; \varepsilon_k + \lambda_i \geq \delta \;,\; i = 1,\ldots,n}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon_k \geq 0 \;\; \& \;\; \varepsilon_k = \max\{\delta - \lambda_i \,;\, i = 1,\ldots,n\}}$$

Noua direcţie de descreştere este:

$$\boldsymbol{d_k = -\left(\varepsilon_k I_n + F_k\right)^{-1} g_k} \;.$$

$\boldsymbol{x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k}$, $\boldsymbol{\alpha_k}$ - se det. cu ajustarea pasului

Metoda gradienţilor conjugaţi (a direcţiilor conjugate)

$$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n} \ , \ \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T \ , \ \boldsymbol{A} > \mathbf{0} \text{ pozitiv definită}$$

$$\min\{f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - x^T b;\ x \in \mathbb{R}^n\}$$

Definiţie

Pentru o matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $A = A^T$ simetrică, doi vectori $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^n$ se numesc ***A*-ortogonali** sau **conjugaţi în raport cu *A*** dacă:

$$d_1^T A d_2 = \left(Ad_2, d_1\right)_{\mathbb{R}^n} = \left(d_2, Ad_1\right)_{\mathbb{R}^n} = \left(Ad_1, d_2\right)_{\mathbb{R}^n} = 0$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{0}_{n \times n} \Rightarrow \forall \boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2 \text{ sunt } \boldsymbol{A} - \text{ortogonali}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}_n \quad \Rightarrow \text{ortogonalitate clasică } \left(\boldsymbol{d}_1, \boldsymbol{d}_2\right)_{\mathbb{R}^n} = \boldsymbol{0}$$

Vectorii $\{\boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{d}_1, \ldots, \boldsymbol{d}_k\}$ se numesc ***A***-ortogonali sau ***A***-conjugaţi dacă:

$$\boldsymbol{d}_i^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{d}_j = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_j, \boldsymbol{d}_i\right)_{\mathbb{R}^n} = \boldsymbol{0} \ , \ \forall \boldsymbol{i} \neq \boldsymbol{j} \ , \ \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{1}, \ldots, \boldsymbol{k}$$

Propoziţie

Fie $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$, $\boldsymbol{A} > \boldsymbol{0}$, şi $\{\boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{d}_1, \ldots, \boldsymbol{d}_k\}$ direcţii ***A***-conjugate, $\boldsymbol{d}_i \neq \boldsymbol{0}$, $\forall \boldsymbol{i} = \boldsymbol{0}, \ldots, \boldsymbol{k}$. Atunci vectorii $\{\boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{d}_1, \ldots, \boldsymbol{d}_k\}$ sunt liniar independenţi.

$$\left.\begin{array}{l} A \in \mathbb{R}^{n\times n} \ \ , \ A = A^T \ \ , \ \ A > 0 \\ \\ \{d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}\} \ \text{ - direcţii } A - \text{conjugate} \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{c} \{d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}\} \\ \text{bază în } \mathbb{R}^n \end{array}$$

$$x^* = \arg\min\{f(x);\ x \in \mathbb{R}^n\} \Leftrightarrow x^* \text{ soluţia sist. } Ax = b$$

$$x^* = \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \cdots + \alpha_{n-1} d_{n-1}$$

$$\Big(\underbrace{Ax^*}_{=b}, d_i\Big)_{\mathbb{R}^n} = d_i^T A x^* = \alpha_i d_i^T A d_i$$

$$\alpha_i = \frac{d_i^T b}{d_i^T A d_i} = \frac{\left(b, d_i\right)_{\mathbb{R}^n}}{\left(A d_i, d_i\right)_{\mathbb{R}^n}}$$

$$x^* = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\left(b, d_i\right)_{\mathbb{R}^n}}{\left(A d_i, d_i\right)_{\mathbb{R}^n}} d_i$$

Procesul iterativ

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad , k = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k} \quad , \quad g_k = A x_k - b$$

are proprietatea că $x_n = x^*$.

$$x_k = x_0 + \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \cdots + \alpha_{k-1} d_{k-1}$$

$$x^* = x_0 + \beta_0 d_0 + \beta_1 d_1 + \cdots + \beta_{n-1} d_{n-1}$$

$$\alpha_i = \frac{d_i^T A(x_k - x_0)}{d_i^T A d_i} \quad , \quad \beta_i = \frac{d_i^T A(x^* - x_0)}{d_i^T A d_i}$$

$$d_k^T A(x_k - x_0) = 0$$

$$x^* - x_k = (\beta_0 - \alpha_0) d_0 + \cdots + (\beta_{k-1} - \alpha_{k-1}) d_{k-1} + \beta_k d_k + \cdots + \beta_{n-1} d_{n-1}$$

Corolar

$$g_k^T d_i = 0 \ \forall i < k$$

Algoritmul gradienţilor conjugaţi

$$x_0 \in \mathbb{R}^n \ , \ g_0 = Ax_0 - b$$

$$d_0 = -g_0 = b - Ax_0$$

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k}$$

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

$$g_{k+1} = Ax_{k+1} - b \ \text{ sau } \ g_{k+1} = g_k + \alpha_k A d_k$$

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k}$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_p \in \mathbb{R}^n$

$$\text{span}\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_p\} = \{\boldsymbol{y} = \boldsymbol{a}_1 \boldsymbol{y}_1 + \cdots + \boldsymbol{a}_p \boldsymbol{y}_p \in \mathbb{R}^n; \boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}, \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{p}\}$$

$$= \text{subspaţiul generat de vectorii } \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_p$$

Teoremă

Presupunem că $\boldsymbol{x}_k \neq \boldsymbol{x}^*$. Avem următoarele relaţii:

(1) $$\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{g}_i = \mathbf{0} \quad \forall \boldsymbol{i} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{k} - \mathbf{1}$$

(2) $$\text{span}\{\boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{g}_1, \ldots, \boldsymbol{g}_k\} = \text{span}\{\boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_0, \ldots, \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{g}_0\}$$

(3) $$\text{span}\{\boldsymbol{d}_0, \boldsymbol{d}_1, \ldots, \boldsymbol{d}_k\} = \text{span}\{\boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_0, \ldots, \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{g}_0\}$$

(4) $$d_k^T A d_i = 0 \;\; \forall i = 0,1,\ldots,k-1$$

Şirul $x_k \to x^*$ în cel mult n paşi.

$\mathcal{K}(g_0, k) = \text{span}\{g_0, Ag_0, \ldots, A^k g_0\}$ - se numeşte **subspaţiu Krylov de grad *k*** pentru g_0.

Forma practică a metodei gradienţilor conjugaţi

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat}, \; k = 0$$

$$g_0 = Ax_0 - b, \quad d_0 = -g_0$$

$$while(g_k \neq 0)$$

$$\begin{cases} \alpha_k = \dfrac{g_k^T g_k}{d_k^T A d_k} \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \\ g_{k+1} = g_k + \alpha_k A d_k \\ \beta_k = \dfrac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k} \\ d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k \\ k = k+1; \end{cases}$$

Teoremă

Dacă matricea $\boldsymbol{A}$ are doar $\boldsymbol{r}$ valori proprii distincte, algoritmul gradienţilor conjugaţi calculează soluţia $\boldsymbol{x^*}$ în cel mult $\boldsymbol{r}$ iteraţii.

Teoremă

Dacă $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$ sunt valorile proprii ale matricii $\boldsymbol{A}$ atunci:

$$\| x_{k+1} - x^* \|_A^2 \le \left(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1} \right)^2 \| x_0 - x^* \|_A^2$$

$$\| x_{k+1} - x^* \|_A^2 = 2E(x_{k+1})$$

$$E(x_{k+1}) \le \left(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1} \right)^2 E(x_0).$$

Metodele neliniare ale gradienţilor conjugaţi

$$f(x) \simeq f(x_k) + \nabla f(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(x - x_k)$$

$$g_k \leftrightarrow \nabla f(x_k)$$

$$A \leftrightarrow \nabla^2 f(x_k)$$

Varianta pentru funcţii oarecare a metodei gradienţilor conjugaţi:

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat}, \; k = 0$$

$$g_0 = \nabla f(x_0), \quad d_0 = -g_0$$

$$while(g_k \neq 0)$$

$$\begin{cases} A = \left[\nabla^2 f(x_k)\right] \\ \alpha_k = -\dfrac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k} \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \\ g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}) \\ \beta_k = \dfrac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k} \\ d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k \\ k = k + 1; \end{cases}$$

Metoda Fletcher-Reeves

α_k se calculează folosind metoda ajustării pasului

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k}$$

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat},$$

$$g_0 = \nabla f(x_0), \quad d_0 = -g_0 \ , \ k = 0$$

$$\boldsymbol{while}\,(\boldsymbol{g}_k \neq 0)$$

$$\begin{cases} \\ \alpha_k = \min\{ f(x_k + \alpha d_k);\ \alpha \in [0, \bar{\alpha})\} \\ \text{(exact sau inexact cu testul lui Wolfe)} \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \\ g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}) \\ \beta_k^{FR} = \dfrac{g_{k+1}^T g_k}{g_k^T g_k} \\ d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k^{FR} d_k \\ k = k+1; \end{cases}$$

Se pune problema dacă $\boldsymbol{d}_k$ sunt direcţii de descreştere?

$$\boldsymbol{d}_k = -\boldsymbol{g}_k + \boldsymbol{\beta}_{k-1}\boldsymbol{d}_{k-1}$$

$$\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{d}_k = -\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{g}_k + \boldsymbol{\beta}_{k-1}\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{d}_{k-1}$$

Dacă se foloseşte ajustarea pasului exactă:
$\boldsymbol{\alpha}_{k-1}$ este punct de minim local pentru $\boldsymbol{f}$ pe direcţia $\boldsymbol{d}_{k-1}$ prin urmare $\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{d}_{k-1} = \mathbf{0}$ $(\boldsymbol{g}_k = \nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k))$.
$\Rightarrow$ $\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{d}_k = -\boldsymbol{g}_k^T \boldsymbol{g}_k = -\|\boldsymbol{g}_k\|_2^2 < \mathbf{0} \Rightarrow \boldsymbol{d}_k$ direcţie de descreştere

Dacă se foloseşte ajustarea pasului inexactă am putea avea $\boldsymbol{g_k^T d_k > 0}$ ($\boldsymbol{d_k}$ direcţie de creştere!!) dar folosind testul lui Wolfe deducem:

$$\boldsymbol{f(x_k + \alpha_k d_k) \le f(x_k) + \varepsilon \alpha_k g_k^T d_k}$$

$$\boldsymbol{|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \le (1-\varepsilon)|g_k^T d_k|}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow g_k^T d_k < 0}$$

Metoda Polak-Ribière

- variantă a metodei Fletcher-Reeves

$$\beta_k^{PR} = \frac{g_{k+1}^T (g_{k+1} - g_k)}{g_k^T g_k}$$

Dacă se face ajustarea pasului inexactă cu testul lui Wolfe nu putem deduce că d_k sunt direcţii de descreştere.

Se foloseşte $\beta_k^+ = \max\{\beta_k^{PR}, 0\}$ şi un test Wolfe adaptat pentru a obţine d_k direcţii de descreştere.

Varianta Hestenes-Stiefel

$$\beta_k^{HS} = \frac{g_{k+1}^T (g_{k+1} - g_k)}{(g_{k+1} - g_k)^T d_k}$$

Precondiţionare

Se consideră norma:

$$\| x \|_A = \sqrt{\left(Ax, x \right)_{\mathbb{R}^n}}$$

Evaluarea erorii în metoda pantei maxime:

$$\| x^{(k)} - x^* \|_A \leq \left(\frac{k(A) - 1}{k(A) + 1} \right)^k \| x^{(0)} - x^* \|_A$$

$k(A) = \dfrac{\lambda_n}{\lambda_1}$ – **numărul de condiţionare spectral**

$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ **valorile proprii ale matricii** A

Avem convergenţă rapidă dacă numărul de condiţionare spectrală al matricii ***A*** este apropiat de **1** (***k(A)≥1*** întotdeauna).
Ideea precondiţionării este de a transforma sistemul ***Ax=b*** astfel încât să îmbunătăţim proprietăţile spectrale.

$$\boldsymbol{Ax = b} \;\rightleftarrows\; \boldsymbol{\tilde{A}x = \tilde{b}}\ ,\ \textbf{cu}\ \boldsymbol{k(\tilde{A}) << k(A)}$$

Precondiţionare

$$\boldsymbol{Ax = b \rightarrow\ M^{-1}Ax = M^{-1}b}\ (\textbf{ la stânga})$$

$$\boldsymbol{\rightarrow\ AM^{-1}y = b}\ ,\ \boldsymbol{x = M^{-1}y}\ (\textbf{ la dreapta})$$

$$\boldsymbol{\rightarrow\ M_1^{-1}AM_2^{-1}y = M_1^{-1}b}\ ,\ \boldsymbol{x = M_2^{-1}\ y}\ (\textbf{split})\ ,\ \boldsymbol{M = M_1M_2}$$

cu $\boldsymbol{M}$ matrice nesingulară , $\boldsymbol{M}$ "$\approx$" $\boldsymbol{A}$. Matricea $\boldsymbol{M}$ sau $\boldsymbol{M}^{-1}$ poartă numele de ***matrice de precondiţionare***.

Cum trebuie să alegem matricea $\boldsymbol{M}$?

- sistemul precondiţionat ($\tilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{b}}$) să fie uşor de rezolvat (convergenţă rapidă)

- matricea de precondiţionare să fie economic de construit şi aplicat – ietarţiile să nu fie costisitor de construit

Matricea de precondiţionare Jacobi

$$M = \mathbf{diag}[a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn}]$$

Matrici de precondiţionare SSOR

$$M = (D + L)\, D^{-1}\, (D + L)^T \quad (A = L + D + L^T)$$

$$M(\omega) = \frac{1}{2-\omega}\left(\frac{1}{\omega}D + L\right)\left(\frac{1}{\omega}D\right)^{-1}\left(\frac{1}{\omega}D + L\right)^T, \ \omega \in (0,2)$$

Pentru ω - optimal, în anumite cazuri:

$$k(M(\omega_{opt})^{-1} A) = O(\sqrt{k(A)})$$

(ω_{opt} - foarte costisitor de calculat)