

Dipartimento di Matematica e Informatica Corso di Laurea Triennale in Informatica

TESI DI LAUREA

Metodi di ottimizzazione su varietà differenziabili per la media di Fréchet su disco di Poincaré

Relatore: Prof. Bruno Iannazzo Candidato: Luca Moroni

Matricola: 311279

Anno Accademico 2020/2021

Contenuti

1	Introduzione												
2	Metodi di ottimizzazione su \mathbb{R}^n e Varieta differenziabili												
	2.1	Condizioni necessarie per l'ottimalità	3										
	2.2	2.2 Il caso della convessità											
	2.3												
	2.4	Discesa del gradiente in R^n	5										
		2.4.1 Selezionare la direzione di discesa	6										
		2.4.2 Selezione del passo	7										
	2.5	Discesa del gradiente su varietà	9										
		2.5.1 Retrazioni	9										
		2.5.2 Metodi <i>line-search</i>	10										
		2.5.3 Convergenza	11										
3	Disc	co di poincare e Iperboloide	12										
	3.1	Iperboloide	12										
		3.1.1 Metrica	12										
		3.1.2 Distanza	13										
		3.1.3 Mappa Esponenziale	13										
		3.1.4 Gradiente della funzione distanza	13										
	3.2	Disco di Poincaré	13										
		3.2.1 Metrica	14										
		3.2.2 Distanza	14										
		3.2.3 Mappa Esponenziale	14										
		3.2.4 Gradiente della funzione distanza	14										
	3.3	Iperboloide come modello conforme	15										
	3.4												
4	Met	todi utilizzati con pseudocodice ed esperimenti	18										
	4.1	Algoritmi e Pseudocodice	18										
		4.1.1 Passo fisso	18										
		4.1.2 Armijo	19										
		4.1.3 Barzilai-Borwein	19										
		4.1.4 LBFGS	21										
	4.2	Esperimenti	22										
5	5 Appendice												
	5.1	Varietà	24										
		5.1.1 Vettori Tangenti	25										
		5.1.2 Metriche distanze e e gradienti Riemanniani	26										
	5.2	Topologia	26										
	5.3	Definizioni Utili	27										

5.3.1	Teorema di Taylor																									2
-------	-------------------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	---

1 Introduzione

Nella seguente trattazione verra presentato il problema del minimo della funzione media di frechet sulla varietà disco di poincare, verra proposta una metodologia risolutiva che consiste nel trasportare il problema su una varieta conforme definita iperboloide, nella quale alcune formule per dimensione arbitraria sono computazionalmente meno onerose (e numericamente piu stabili ?)

2 Metodi di ottimizzazione su \mathbb{R}^n e Varieta differenziabili

Nella presente trattazione i vettori verranno indicati tramite le ultime lettere minuscole dell'alfabeto x,v,w, che assumeremo essere vettori colonna, il trasposto di un vettore verrà identificato tramite il carattere apice (') perciò per definire il prodotto scalare euclideo di due vettori u,v scriveremo u'v, mentre se si intende un prodotto scalare differente da quello euclideo, come è il prodotto scalare riemanniano, lo indicheremo con $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

In tale sezione andremo ad esplicitare le metodologie generali per trovare un minimo di una funzione f definita su una varieta differenziabile M a valori reali (notiamo che \mathbb{R}^n è un caso particolare di varietà differenziabile). Cercheremo di trovare quei punti che garantiscono l'ottimalità di una funzione, ovvero punti di massimo e di minimo, che descriveremo a breve.

Sia $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ non vincolata. Un vettore x^* è un minimo locale non vincolato per la funzione f se, informalmente, f assume un valore in x^* non più grande dei valori che assume in un intorno di x^* stesso. Più formalmente x^* è minimo locale per f se esiste $\epsilon>0$ tale che

$$f(x^*) \le f$$
, per ogni x con $||x - x^*|| < \epsilon$

 $\parallel x \parallel$ rappresenta la norma euclidea del vettore x.

Un vettore x^* è un minimo globale non vincolato rispetto ad f se la funzione assume un valore in x^* non più grande dei valori che assume in ogni altro vettore nel proprio dominio, più formalmente x^* è tale che

$$f(x^*) \le f$$
, per ogni $x \in \mathbb{R}^n$

2.1 Condizioni necessarie per l'ottimalità

Se la funzione di costo f è differenziabile, possiamo utilizzare il gradiente e l'espansione in serie di Taylor per comparare il costo di un vettore con il costo di un suo intorno.

Ci aspettiamo perciò che se x^* è un minimo non vincolato allora la variazione della funzione al primo ordine per una piccola variazione Δx è non negativa

$$\nabla f(x^*)' \Delta x \ge 0.$$

Perciò valendo sia per Δx positivi che negativi abbiamo la seguente condizione necessaria.

$$\nabla f(x^*)' = 0.$$

Ci aspettiamo inoltre che anche la variazione della funzione al secondo ordine per una piccola variazione di Δx è non negativa,

$$\nabla f(x^*)' \Delta x + (1/2) \Delta x' \nabla^2 f(x^*) \Delta x \ge 0$$

dato che la precedente osservazione ha imposto $\nabla f(x^*)'\Delta x = 0$ otteniamo che

$$\Delta x' \nabla^2 f(x^*) \Delta x > 0$$

e che perciò

 $\nabla^2 f(x^*)$ è una matrice semidefinita positiva.

Diamo il seguente risultato che sintetizza quanto detto fin'ora.

Proposizione 1 (Condizioni necessarie di ottimalità) Sia x^* un minimo locale non vincolato di $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, assumiamo f differenziabile con continuità in un insieme aperto S contenente x^* . Allora

$$\nabla f(x^*) = 0$$

Se f è due volte differenziabile con continuità in S, allora

 $\nabla^2 f(x^*)$ è una matrice semidefinita positiva.

2.2 Il caso della convessità

Se la funzione f è convessa su un insieme convesso non ci sono distinzioni tra un minimo locale ed un minimo globale, tutti i punti di minimo locale sono anche punti di minimo globale. Perciò un fatto importante è che la condizione $\nabla f(x^*) = 0$ è sufficiente per l'ottimalità, da cui deriva il seguente risultato.

Proposizione 2 (Funzioni Convesse) Sia $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una funzione convessa su un insieme convesso X.

- Un minimo locale di f su X è anche un minimo globale su X. Se inoltre f è strettamente convessa, allora esiste al più un minimo per f.
- Se f è convessa e l'insieme X è aperto, allora $\nabla f(x^*) = 0$ è una condizione necessaria e sufficiente per il vettore $x^* \in X$ per essere minimo globale di f su X.

2.3 Condizioni Sufficienti per L'ottimalità

Non è difficile trovare esempi in cui le condizione di ottimalita necessarie definite nelle sezione precedente $[\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{e} \quad \nabla^2 f(x^*) \geq 0]$ portino ad identificare punti che non sono di minimo locale come ad esempio punti di sella o punti di massimo.

Supponiamo di avere un vettore x^* che soddisfa le seguenti condizioni

- $-\nabla f(x^*) = 0.$
- $\nabla^2 f(x^*)$ è una matrice definita positiva.

Allora abbiamo che per ogni $\Delta x \neq 0$ con $\Delta x \in \mathbb{R}^n \setminus 0$

$$\Delta x' \nabla^2 f(x^*) \Delta x > 0$$

Ciò implica che in x^* la variazione di f al secondo ordine data da un piccolo spostamento Δx è positiva, perciò f tende ad incrementare nell'intorno di x^* e ciò implica che le due condizioni di cui sopra sono necessarie e sufficienti per l'ottimalità locale di x^* .

Proposizione 3 (Condizioni di ottimalità sufficienti del secondo ordine) Sia $f:S\subset R^n\to R$ derivabile due volte con continuità. Si supponga che esista $x^*\in S$ che soddisfi le condizioni

$$\nabla f(x^*) = 0$$
 e $\nabla^2 f(x^*) \dot{e}$ una matrice definita positiva.

Allora, x^* è un minimo locale di f. In particolare esistono $\gamma > 0$ e $\epsilon > 0$ tali che

$$f(x) \geq f(x^*) + \frac{\gamma}{2} \parallel x - x^* \parallel^2, \quad \textit{per ognix} \quad \textit{con} \parallel x - x^* \parallel < \epsilon$$

2.4 Discesa del gradiente in \mathbb{R}^n

Andiamo ora a definire nel dettaglio le principali metodologie computazionali di ottimizzazione non lineare su \mathbb{R}^n . Tali metodologie saranno trattate con un

occhio alle possibili applicazioni.

Consideriamo il problema di trovare il minimo non vincolato di una funzione $f:R^n\to R$. Nella maggior parte di casi non è possibile trovare una soluzione analitica, perciò l'approccio adottato è quello di applicare un algoritmo iterativo chiamato *iterative descent* che opera come segue: prendiamo un vettore iniziale x^0 e successivamente generiamo una sequenza x^1, x^2, \ldots tale che f decresce ad ogni iterazione $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ e sperabilmente converga un punto di minimo.

I principali algoritmi di discesa sono metodi del gradiente poichè sono basati sul gradiente della funzione f.

2.4.1 Selezionare la direzione di discesa

Sia $v \in R^n \setminus 0$, v^{\perp} è un iperpiano, contenente i punti tali che v'd=0, divide lo spazio in due componenti connesse:

- v'd > 0 (semipiano).
- v'd < 0 (semipiano).

Se $v = \nabla f(x)$ ognid tale che v'd < 0 è una direzione di decrescita, come mostrato nel seguente teorema.

Teorema 1 Sia $f \in C^1(\Omega)$, con Ω aperto di R^n e sia $x \in \Omega$ e $\nabla f(x) \neq 0$ per ogni $d \in R^n$ tale che $\nabla f(x)'d < 0$ ed esiste $\alpha^0 > 0$ tale che $f(x+\alpha d) < f(x)$ con $\alpha \in (0,\alpha^0]$

Detto ciò possiamo dare una classe di algoritmi con $x^0 \in \Omega$ e dove $d_k \in \mathbb{R}^n$ è detta direizione ed α_k è detto passo, definiti secondo la seguente formula,

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$$
 $k = 0, 1, ...,$

Dove se $\nabla f(x^k) \neq 0$ la direzione d^k è scelta in modo tale che

$$\nabla f(x^k)'d^k < 0$$

Ci sono varie possibilita nella scelta di d^k e di α^k . Molti metodi di gradiente sono definiti nella forma,

$$x^{k+1} = x^k - \alpha^k D^k \nabla f(x^k),$$

dove D^k è una matrice definita positiva e con $d^k=-D^k\nabla f(x^k)$ allora è immediato verificare che $\nabla f(x^k)'d^k<0$.

A seconda della scelta di \mathbb{D}^k abbiamo differenti metodi applicabili.

- **Steepest Descent**: $D^k = I$, k = 0, 1, ...
- Metodi di Newton: $D^k = (\nabla^2 f(x^k))^{-1}, \quad k = 0, 1, ..., \nabla^2 f(x^k)$ deve essere definita positiva, proprietà sempre verificata se f è convessa.
- Steepest Descent Riscalata: D^k matrice diagonale.
- Metodi di Schamansky: $D^k = (\nabla^2 f(x^0))^{-1}$.
- Metodi di quasi Newton: $D^k = H(x^k) \approx \nabla^2 f(x^k)$.

Nonostante i metodi di Newton convergono molto velocemente, non sono utilizzati nella pratica dal momento in cui il calcolo della matrice hessiana è computazionalmente oneroso, perciò sono stati introdotti i metodi di quasi Newton, nel qual caso la matrice D^k è scelta in modo tale che la direzione $d^k = -D^k \nabla f(z^k)$ tenda ad approssimare la direzione del metodo di Newton, e D_k approssima la matrice hessiana. L'idea fondamentale riguardo questa metodologia è che tramite due iterate successive k, k+1 ed i valori $x^k, x^{k+1}, \nabla f(x^k), \nabla f(x^{k+1})$ noi possiamo avere accesso a delle informazioni riguardo la matrice hessiana, in particolare abbiamo che

$$(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \approx H(x^{k+1})(x^{k+1} - x^k).$$

Definiti $p^k = x^{k+1} - x^k$ e $q^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$ allora D^{k+1} deve soddisfare l'uguaglianza $D^{k+1}p^k = q^k$, questo prende il nome di equazione delle secanti.

2.4.2 Selezione del passo

Ci sono numerose metodologie per la scelta del passo a^k nei metodi del gradiente, ne elenchiamo alcune.

Ricerca lineare esatta:

scegliamo α^k tale che minimizza la funzione costo f lungo la direzione d^k , perciò $f(x^k + \alpha^k d^k) = \min_{\alpha \geq 0} f(x^k + \alpha d^k)$.

Ricerca lineare esatta limitata:

Questa è una versione modifica della metodologia precedente più semplice da implementare in vari casi. definito un scalare s>0 α^k è scelto in modo tale che minimizza il costo di f nell'intervallo [0,s]

$$f(x^k + \alpha^k d^k) = \min_{\alpha \in [0,s]} f(x^k + \alpha d^k).$$

Le due metodologie appena presentate sono solitamente implementate con l'aiuto delle tecniche risolutive dell'ottimizzazione in una variabile, che è un problema certamente più facile da risolvere in modo analitico.

Metodo di Armijo:

Scegliere α^k in modo che garantisca una decrescita sufficiente a garantire la convergenza del metodo sotto opportune ipotesi. Il metodo di armijo è stato definito come segue. Siano fissati s,β e σ con $0<\beta<1$, e $0<\sigma<1$ e sia $\alpha^k=\beta^{m_k}s$, dove m_k è il primo intero non negativo per cui vale

$$f(x^k) - f(x^k + \beta^m s d^k) \ge -\sigma \beta^m s \nabla f(k)' d^k$$
.

Solitamente si scelgono i valori come segue, $\sigma \in [10^{-5}, 10^{-1}]$, il fattore di riduzione $\beta \in [1/10, 1/2]$, possiamo scegliere s=1 e moltiplicare la direzione d^k per uno scalare.

Per questa metodologia diamo anche il seguente teorema che rappresenta un risultato importante.

Definizione 1 Una successione di direzioni $\{d^k\}_k$ è detta limitata se vale la seguente,

$$\parallel d^k \parallel < M$$
 per ogni k con $M \in \mathbb{R}^+$

Definizione 2 Una successione di direzioni $\{x^k\}_k$, $\{d^k\}_k$ è detta **gradient related** se per ogni sotto-successione di $\{x^k\}_k$ che converge ad un punto non stazionario $\{d^k\}_k$ è limitata ed inoltre vale $\limsup_{k\in K} \nabla f(x)'d^k < 0$.

Ora diamo il risultato principale che garantisce la convergenza globale per metodi di discesa che utilizzano la tecnica di Armijo.

Teorema 2 Sia $\{x^k\}_k$ una sequenza infinita (non definitivamente uguale al suo limite) generata dal metodo $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$, dove α^k è generato con la regola di armijo e d^k è **gradient related**. Allora ogni punto limite è stazionario.

Metodo a passo costante:

Si definisce un passo costante s>0 e si fissa $\alpha^k=s,\quad k=0,1,...$

Il passo costante è una metodologia veramente semplice da implementare ma si deve fare attenzione nella scelta del passo, se si sceglie un valore di s troppo grande allora il metodo divergerà, contrariamente se il passo s venisse scelto troppo piccolo l'ordine di convergenza risulterebbe troppo lento.

Metodo di diminuzione del passo:

Scegliamo il passo in modo tale che $\alpha^k \to 0$. Una problematica legata a questa metodologia è che il passo può diventare troppo piccolo per cui non può essere garantita la convergenza, per questa ragione viene richiesto che $\sum_{n=1}^{\infty} \alpha^k = \infty$

2.5 Discesa del gradiente su varietà

Ora che abbiamo un contesto teorico e una consapevolezza di cosa voglia dire effetutare ottimizzazione su uno spazio euclideo n-dimensionale (R^n) , possiamo approcciare le metodologie computazionali per trovare un minimo non vincolato di una funzione $f:M\to R$ analoghe a quella definite nella sezione precedente. Prima di andare nel vivo del discorso dobbiamo però munirci degli strumenti necessari, richiamiamo la parte dedicata alle varietà differenziabili presente nell'appendice e aggiungiamo quanto segue.

2.5.1 Retrazioni

Su varietà differenziabili la nozione di muoversi nella direzione del vettore tangente rimanendo nella varietà stessa è generalizzato dal concetto di **Retrazione**, concettualmente una retrazione R su x, denominata come R_x , è una mappa che va da T_xM (spazio tangente in x rispetto a M) in M con una condizione di rigidità locale che preserva il gradiente in x.

Definizione 3 (Retrazione) Una retrazione in una varietà M è una mappa liscia R che ha come dominio l'insieme dei T_xM $\forall x \in M$ in M con le seguenti proprietà. Sia R_x la restrizione di R a T_xM .

- $R_x(0_x) = x$, dove 0_x denota l'elemento zero (origine) di T_xM .
- Con l'identificazione canonica $T_{0_x}T_xM \simeq T_xM$, R_x soddisfa $DR_x(0_x) = id_{T_xM}$, dove id_{T_xM} denota la mappa identità su T_xM .

Ci riferiamo alla condizione $DR_x(0_x)=id_{T_xM}$ come condizione di *rigidità locale*. Equivalentemente, per ogni vettore tangente ξ in T_xM , la curva $\gamma_{\xi}:t\mapsto R_x(t\xi)$ soddisfa $\gamma_{\xi}(0)'=\xi$.

Oltre a trasformare elementi di T_xM in elementi di M, un secondo importate scopo della retrazione R_x è quello di trasformare una funzione costo $(f:M\to R)$ definita in un intorno di $x\in M$ in una funzione costo definita sullo spazio vettoriale T_xM . Nello specifico, data una funzione reale f su una varietà M su cui è definita una retrazione R, abbiamo che $\hat{f}=f\circ R$ denota il pullback di f attraverso R. Per $x\in M$, abbiamo che

$$\hat{f}_x = f \circ R_x$$

denota la restrizione di \hat{f} su T_xM . Si noti che \hat{f}_x è una funzione reale su uno spazio vettoriale. Dalla condizione di rigidità locale abbiamo che $D\hat{f}_x(0_x) = Df(x)$. Se M è dotato di una metrica Riemanniana abbiamo

$$\operatorname{grad} \hat{f}_x(0_x) = \operatorname{grad} f(x).$$

In alcuni casi può essere necessario dover effettuare operazioni tra vettori appartenenti a spazi tangente diffenti, come ad esempio nel caso dei metodi di ottimizzazzione quasi Newton. Nell'ottimizzazione basata su retrazioni lo strumento standard per trasportare vettori appartenenti ad uno spazio tangente in un altro spazio tangente è il trasportovettoriale. Informalmente, dati due vettori tangenti ad x, chiamati $v_x, w_x \in T_x M$, un trasporto vettoriale $\mathcal T$ associato ad una retrazione R, è una mappa liscia che genera un vettore appartenente ad $T_{R_x(w_x)}M$. Per semplicità utilizzeremo la notazione $\mathcal T_{x\to y}(v)$.

Un caso speciale di trasporto vettoriale è il trasporto parallelo che puo essere interpretato come un trasporto vettoriale la cui retrazione associata è la mappa esponenziale.

2.5.2 Metodi line-search

I metodi di ricerca in linea (definiti *line-search*) su varietà si basano sulla formula di aggiornamento

$$x^{k+1} = R_{x^k}(t^k \eta^k),$$

dove η^k è in T_xM e t^k è uno scalare. Una volta scelta la retrazione R ci rimane da decidere la direzione η^k e la lunghezza del passo t^k . Per ottenere la convergenza del metodo delle restrizioni sulla scelta di questi due parametri devono essere fatte.

Definizione 4 (sequenza gradient related su varietà) Data una funzione di costo f su una varietà riemanniana M, una sequenza $\{\eta^k\}$, $\eta^k \in T_x M$ è gradient related se per ogni sotto-sequenza $\{x^k\}_{k \in K}$ di $\{x^k\}$ che converge ad un punto non stazionario di f, la corrispondente sotto-sequenza $\{\eta^k\}_{k \in K}$ è limitata e soddisfa $\limsup_{k \to \infty, k \in K} \langle \operatorname{grad} f(x^k), \eta^k \rangle < 0$

Definizione 5 (Punto di Armijo su varietà) Data una funzione f su una varietà riemanniana M dotata di una retrazione R, un punto $x \in M$, un vettore tangente $\eta \in T_x M$, e degli scalari $\bar{\alpha} > 0, \beta, \sigma \in (0,1)$, un **punto di Armijo su varietà** è $\eta^A = t^A \eta = \beta^m \bar{\alpha} \eta$, dove m è il più piccolo intero non negativo tale che $f(x) - f(R_x(\beta^m \bar{\alpha} \eta)) \geq -\sigma \langle \operatorname{grad} f(x), \beta^m \bar{\alpha} \eta \rangle_x$. Il valore reale t^A è il **Passo di Armijo**.

Andiamo ora a definire un algoritmo generico per la discesa di gradiente su varietà (**Accelerated Line Search**), tale algoritmo rappresenta una generalità di metodologie di ottimizzazione delineando però, nel contempo, delle restrizioni fondamentali che garantiscono la convergenza della sequenza di punti generati.

Algorithm 1: Accelerated Line Search (ALS)

Input: Manifold M; funzione costo f differenziabile definita su M; retraction R; scalari $\bar{\alpha} > 0$, c, β , $\sigma \in (0, 1)$; initial iterate $x^0 \in M$

Output: Sequenza $\{x^k\}$

for k = 0, 1, 2, ... do

Prendere $\eta^k \in T_xM$ tale per cui la sequenza $\{\eta^i\}_{i=0,1,\dots}$ sia gradient related.

Selezionare x^{k+1} tale che

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) \ge c(f(x^k) - f(R_{x^k}(t^{k^A}\eta^k))) \tag{1}$$

Dove t^{k^A} è il passo definito dalla regola di Armijo su varietà definita poco sopra.

end

Dallo pseudocodice appena esplicitato è chiaro che tale algoritmo puo essere visto come una generalizzazione della scelta del passo di Armijo descritto nella sotto-sezione 2.2, difatti scegliere $x^{k+1} = R_{x^k}(t^{k^A}\eta^k)$ soddisfa (1). Inoltre la condizione rilassata (1) ci permette un ampio spazio di manovra nella scelta di x^{k+1} grantendoci la convergenza ad un punto stazionario, come enunceremo formalmente, e ciò puo portare alla definizione di algoritmi altamente efficienti.

2.5.3 Convergenza

Il concetto di convergenza puo essere ridefinito e generalizzato su varietà. Una sequenza infinita $\{x^k\}_{k=0,1,\dots}$ di punti su una varietà M è detta essere convergente se esiste una carta (U,ψ) di M, un punto $x^*\in M$ e K>0 tali che x^k è in U per ogni $k\geq K$ e tale che la sequenza $\{\psi(x^k)\}_{x=K,K+1,\dots}$ converge a $\psi(x^*)$ (in tal caso applichiamo il concetto di convergenza di R^n , avendo ψ come codominio uno spazio euclideo). Il punto $\psi^{-1}(\lim_{k\to\infty}\psi(x^k))$ è chiamato il limite della sequenza $\{x^k\}_{k=0,1,\dots}$. Tutte le sequenze convergenti di una varietà di Hausdorff hanno uno ed un solo punto limite.

Diamo ora un importante risultato rispetto alla convergenza dell'algoritmo ALS, tale enunciato deriva direttamente dal risultato di convergenza definito nella sezione 2.2 rispetto al passo di Armijo in \mathbb{R}^n , in tal caso però viene data una generalizzazione di quest'ultimo essendo, come già detto, ALS una generalizzazione del passo di Armijo e lavorando non più su \mathbb{R}^n ma su varietà differenziabili.

Teorema 3 Sia $\{x^k\}$ una sequenza infinita di iterate generate da ALS. Allora ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}$ è un punto stazionario della funzione costo f

Inoltre assumendo compattezza della varietà M possiamo enunciare il seguente

Corollario 1 Sia $\{x^k\}$ una sequenza finita di iterate generata da ALS. Assumiamo che l'insieme di livello $L = \{x \in M : f(x) \leq f(x^0)\}$ è compatto allora $\lim_{k \to \infty} \| \operatorname{grad} f(x^k) \| = 0$.

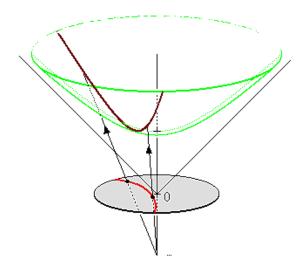


Figure 1: Rappresentazione della proiezione stereografica tra disco e iperboloide

3 Disco di poincare e Iperboloide

Lo spazio iperbolico può essere definito in vari modi equivalenti, noi descriveremo l'iperboloide ed il disco di poincare, ciascuno di questi è un modello dello spazio iperbolico ed inoltre nessuno dei due è prevalente in letteratura.

3.1 Iperboloide

Possiamo definire H^n come il luogo dei punti di norma -1 in $R^{n:1}$, dotato dell'usuale prodotto di minkowski $(\langle u,v\rangle_{n:1}=\sum_{i=1}^n u_iv_i-u_{n+1}v_{n+1};\quad u,v\in R^{n+1})$, questo luogo di punti ha in realta due componenti connesse, noi ne scegliamo una. Definiamolo come segue.

Definizione 6 (Iperboloide) Il modello dell'iperboloide è definito nel modo seguente.

$$H^n = \{x \in R^{n+1} | \langle x, x \rangle_{n:1} = -1; \quad x^{n+1} > 0\}.$$

Lo spazio tangente in un punto $p \in H^n$ è $T_pH^n = \{x \in R^{n:1} | \langle p, x \rangle_{n:1} = 0\}$. Possiamo asserire che l'iperboloide è una varietà riemanniana. Andiamo ora ad esplicitare gli strumenti necessari per effettuare ottimizzazione su questa varietà.

3.1.1 Metrica

La metrica, definita nel TangentBundle dell'iperboloide, è la metrica indotta dal prodotto di Minkowski già esplicitata.

3.1.2 Distanza

La distanza tra due punti dell'iperboloide rappresenta la lunghezza della geodedica che unisce i due punti, è definita come segue.

$$d_{H^n}(u, v) = arccosh(-\langle u, v \rangle_{n:1}); \quad u, v \in H^n.$$

3.1.3 Mappa Esponenziale

La mappa esponenziale definita su $p \in H^n$ e $v \in T_pH^n$, che ha proprietà di retrazione, rappresenta la curva geodedica calcolata nel punto 1 originaria in p con derivata in 0 punto pari a v. E' definita come segue.

$$Exp_p(v) = cosh(||v||_{n:1})p + sinh(||v||_{n:1})\frac{v}{||v||_{n:1}}.$$

3.1.4 Gradiente della funzione distanza

La deifinize dell'iperboloide e dello spazio di minkowski nel quale è costruito ci aiuta nel calcolo del gradiente della funzione distanza.

Data una funzione costo E qualsiasi possiamo calcolarne il gradiente in un punto $p \in H^n$, anch'esso arbitrario, passando dapprima per il gradiente definito nell'ambiente, in tal caso lo spazio di minkowski, ricordiamo che quest'ultimo è cosi definito.

$$nabla_p^{R^{n:1}}E = \left(\frac{\partial E}{\partial x_1}|_p, ..., \frac{\partial E}{\partial x_n}|_p, -\frac{\partial E}{\partial x_{n+1}}|_p\right).$$

Una volta calcolato il gradiente nell'ambiente procediamo a proiettarlo nello spazio tangente del punto $p \in H^n$ come segue.

$$\nabla_p^{H^n} E = \nabla_p^{R^{n:1}} E + \langle p, \nabla_p^{R^{n:1}} E \rangle_{n:1} p.$$

Relativamente al problema della media di fréchet che andremo ad esplicitare definiamo la seguente formula rappresentante il gradiente su spazio di minkowski della funzione distanza.

$$\nabla_u^{R^{n:1}} d_{H^n}(u, v) = -(\langle u, v \rangle_{n:1}^2 - 1)^{-1/2} v.$$

3.2 Disco di Poincaré

Andiamo ora a definire l'altro modello dello spazio iperbolico, definito come l'insieme dei punti di norma strettamente minore di 1 in \mathbb{R}^n .

Definizione 7 (Disco di Poincaré) Il modello del disco di poincare è definito nel modo seguente

$$D^n = \{ x \in R^n | \| x \| < 1 \}$$

Essendo D^n un sottoinsieme di \mathbb{R}^n lo spazio tangente in ogni punto di D^n è \mathbb{R}^n . Possiamo asserire che il disco di Poincaré è una varietà riemanniana. Come fatto per l'iperboloide andiamo ad esplicitare i vari strumenti necessari per effettuare ottimizzazione.

3.2.1 Metrica

La metrica, definita nello spazio tangente del disco di poincaré T_pD^n rispetto ad un punto $p \in D^n$, è la seguente.

$$g^D=\lambda_p^2g^E$$
; con $\lambda_p=rac{2}{1-\parallel p\parallel^2}$ e con g^E la metrica euclidea.

3.2.2 Distanza

La distanza tra due punti del disco di Poincaré rappresenta la lunghezza della geodedica che unisce i due punti, è definita come segue.

$$d_{D^{n}}(u,v) = arccosh(1 + \frac{\parallel u - v \parallel^{2}}{(1 - \parallel u \parallel^{2})(1 - \parallel v \parallel^{2})})$$

3.2.3 Mappa Esponenziale

La mappa esponenziale definita su $p \in D^n$ e $v \in T_pD^n$, rappresenta la curva geodedica calcolata nel punto 1 originaria in p con derivata in 0 punto pari a v. E' definita come segue.

$$Exp_{p}(v) = \frac{\lambda_{p}(\cosh(\lambda_{p} \parallel v \parallel) + \langle p, \frac{v}{\parallel v \parallel} \rangle \sinh(\lambda_{p} \parallel v \parallel))p}{1 + (\lambda_{p} - 1)\cosh(\lambda_{p} \parallel v \parallel) + \lambda_{p} \langle p, \frac{v}{\parallel v \parallel} \sinh(\lambda_{p} \parallel v \parallel)} + \frac{\frac{1}{\parallel v \parallel} \sinh(\lambda_{p} \parallel v \parallel)v}{1 + (\lambda_{p} - 1)\cosh(\lambda_{p} \parallel v \parallel) + \lambda_{p} \langle p, \frac{v}{\parallel v \parallel} \sinh(\lambda_{p} \parallel v \parallel)}$$

3.2.4 Gradiente della funzione distanza

Dati $u,v\in D^n$ la formula del gradiente riemanniano della funzione distanza è dato da.

$$\nabla_{u}^{E}d(u,v) = \frac{4}{b\sqrt{c^{2}-1}}(\frac{(\parallel v \parallel^{2} - 2\langle u,v \rangle + 1)v}{a^{2}} - \frac{v}{a})$$
 con $a = 1 - \parallel u \parallel^{2}$, $b = 1 - \parallel v \parallel^{2}$, $c = 1 + \frac{2}{ab} \parallel u - v \parallel^{2}$

Sappiamo che per per ricavare il gradiente riemanniano dal gradiente euclideo è sufficiente riscalare ∇^E per l'inverso della metrica riemanniana, perciò,

$$\nabla_u^{D^n} d(u, v) = \frac{\nabla_u^E d(u, v)}{\lambda_u^2}.$$

3.3 Iperboloide come modello conforme

Come inizialmente accennato le due varietà trattate fin'ora sono due modelli conformi dello spazio iperbolico ovvero, esiste un diffeomorfismo invertibile conforme (mantiene gli angoli ma non le lunghezze) che porta da una varietà all'altra. Il diffeomorfismo in questione è la proieizone stereografica ρ definita come segue.

$$\begin{split} \rho: H^n \to D^n \\ \rho(x) &= \frac{1}{x_{n+1}+1}(x_1,...,x_n) \text{ ; con } x \in H^n \\ \rho^{-1}: D^n \to H^n \\ \rho^{-1}(y) &= \frac{2}{1-r}(y_1,...,\frac{1+r}{2}) \text{ ; con } r = \parallel y \parallel^2 \text{ e } y \in D^n \end{split}$$

A questo punto facciamo vedere che vale la seguente uguaglianza, ci sarà utile nella sezione successiva.

$$d_{D^n}(a,b) = d_{H^n}(\rho^{-1}(a), \rho^{-1}(b))$$

Daremo due risultati, dimostreremo che l'uguaglianza è valida, dando dapprima una dimostrazione per n=2, e poi la generalizzeremo per n qualsiasi.

Caso n = 2, siano $a, b \in D^2$.

$$a = (a_1, a_2)$$

$$b = (b_1, b_2)$$

$$\rho^{-1}(a) = \frac{2}{1 - r_a} (a_1, a_2, \frac{1 + r_a}{2})$$

$$\rho^{-1}(b) = \frac{2}{1 - r_b} (b_1, b_2, \frac{1 + r_b}{2})$$

con
$$r_a = (a_1^2 + a_2^2)$$
 e $r_b = (b_1^2 + b_2^2)$

$$d_{H^{n}}(\rho^{-1}(a), \rho^{-1}(b)) =$$

$$arccosh(-\langle (\frac{2a_{1}}{1-r_{a}}, \frac{2a_{1}}{1-r_{a}}, \frac{1+r_{a}}{1-r_{a}}), (\frac{2b_{1}}{1-r_{b}}, \frac{2b_{1}}{1-r_{b}}, \frac{1+r_{b}}{1-r_{b}})\rangle_{2:1}) =$$

$$arccosh(-(\frac{4a_{1}b_{1}}{(1-r_{a})(1-r_{b})} + \frac{4a_{2}b_{2}}{(1-r_{a})(1-r_{b})} - \frac{(1+r_{a})(1+r_{b})}{(1-r_{a})(1-r_{b})}) =$$

$$arccosh(\frac{(1+r_{a})(1+r_{b}) - 4a_{1}b_{1} - 4a_{2}b_{2}}{(1-r_{a})(1-r_{b})}) =$$

$$arccosh(\frac{1+r_{a}+r_{b}+r_{a}r_{b} - 4a_{1}b_{1} - 4a_{2}b_{2}}{1-r_{a}-r_{b}+r_{a}r_{b}}) =$$

$$arccosh(\frac{1-r_{a}-r_{b}+2r_{a}+2r_{b}+r_{a}r_{b} - 4a_{1}b_{1} - 4a_{2}b_{2}}{1-r_{a}-r_{b}+r_{a}r_{b}}) =$$

$$arccosh(1+\frac{2r_{a}+2r_{b}-4a_{1}b_{1}-4a_{2}b_{2}}{(1-r_{a})(1-r_{b})}) =$$

$$arccosh(1+2\frac{r_{a}+r_{b}-2a_{1}b_{1}-2a_{2}b_{2}}{(1-r_{a})(1-r_{b})}) =$$

$$arccosh(1+2\frac{\|a-b\|^{2}}{(1-\|a\|^{2})(1-\|b\|^{2})}) =$$

$$d_{D^{n}}(a,b).$$

Facciamo vedere ora che l'uguaglianza vale anche nel caso in cui n è un valore generico, siano $a,b \in D^n$. Procediamo facendo vedere che i due termini dell'uguaglianza rappresentano la stessa quantità.

$$d_D(a,b) = \operatorname{arccosh}(1 + 2 \frac{\parallel a + b \parallel^2}{(1 - \parallel a \parallel^2)(1 - \parallel b \parallel^2)})$$
$$d_H(\rho^{-1}(a), \rho^{-1}(b)) = \operatorname{arccosh}(-\langle \rho^{-1}(a), \rho^{-1}(b) \rangle_{n:1})$$

Facciamo vedere ora, che gli argomenti della funzione arccosh, nelle due equazioni riportate, rappresentano in realtà lo stesso valore.

$$-\langle \rho^{-1}(a), \rho^{-1}(b) \rangle_{n:1} =$$

$$-\langle \frac{2}{1-\parallel a \parallel^2} \left[\frac{a}{1+\parallel a \parallel^2} \right], \frac{2}{1-\parallel b \parallel^2} \left[\frac{b}{1+\parallel b \parallel^2} \right] \rangle_{n:1} =$$

$$\frac{4}{(1-\parallel a \parallel^2)(1-\parallel b \parallel^2)} \left(a'b - \frac{(1+\parallel a \parallel^2)(1+\parallel b \parallel^2)}{4} \right) =$$

$$\frac{-4a'b+1+\parallel a \parallel^2+\parallel b \parallel^2+\parallel a \parallel^2 \parallel b \parallel^2}{(1-\parallel a \parallel^2)(1-\parallel b \parallel^2)} =$$

$$\frac{-4a'b+1+2\parallel a \parallel^2+2\parallel b \parallel^2-\parallel a \parallel^2-\parallel b \parallel^2}{(1-\parallel a \parallel^2)(1-\parallel b \parallel^2)} =$$

$$\frac{-4a'b+1+2\parallel a \parallel^2+2\parallel b \parallel^2-\parallel a \parallel^2-\parallel b \parallel^2+\parallel a \parallel^2 \parallel b \parallel^2}{(1-\parallel a \parallel^2)(1-\parallel b \parallel^2)} =$$

$$1+2\frac{\parallel a-b\parallel^2}{(1-\parallel a \parallel^2)(1-\parallel b \parallel^2)}$$

3.4 Media di Fréchet e problema del centroide

Definizione 8 (Media di Fréchet) La funzione media di Fréchet di p-punti è cosi definita.

$$f(\Theta) = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{p} d^{2}(\Theta, x^{(i)}).$$

Il problema di trovare il centroide di p-punti consiste nel trovare il punto che minimizza la funzione media di Fréchet definita a partire dai punti in questione, il cui minimo esiste ed è unico. Tale problema può essere risolto direttamente in uno spazio euclideo il cui minimo è dato dalla media aritmetica dei p-punti. Mentre in uno spazio iperbolico, come nel nostro caso, la soluzione non è diretta e perciò si applicano le metodologie di ottimizzazione su varietà differenziabili viste precedentemente.

Diamo ora una congettura che possiamo affermare essere corretta in funzione dell'uguaglianza $d_{D^n}(a,b)=d_{H^n}(\rho^{-1}(a),\rho^{-1}(b))$ che abbiamo verificato nella sezione precedente.

Dati $a^{(i)}, \Theta \in D^n$; con i=1...p dall'uguaglianza precedente è facile notare che $\frac{1}{p}\sum_{i=1}^p d_{D^n}^2(\Theta, a^{(i)}) = \frac{1}{p}\sum_{i=1}^p d_{H^n}^2(\rho^{-1}(\Theta), \rho^{-1}(a^{(i)}))$, perciò essendo ρ un diffeomorfismo se $\exists \Theta \in D^n$ per cui $\frac{1}{p}\sum_{i=1}^p d_{D^n}^2(\Theta, a^{(i)})$ è minima allora esiste $\exists \Psi \in H^n$ per cui è minima $\frac{1}{p}\sum_{i=1}^p d_{H^n}^2(\Psi, \rho^{-1}(a^{(i)}))$. Essendo inoltre $f(x) = \hat{f} = f(\rho^{-1}(x))$ allora cercare il minimo di \hat{f} equivale a cercare il minimo di $\hat{f} \circ \rho^{-1}$.

In funzione di tale congettura possiamo trasportare il problema definito su disco di Poincaré nella varieta Iperboloide e viceversa, notiamo che le formule necessarie ad effettuare ottimizzazione sulla varietà iperboloide sono computazionalmente meno complesse rispetto a quelle definite per il disco di Poincaré.

4 Metodi utilizzati con pseudocodice ed esperimenti

In questa sezione andremo a definire lo pseudocodice degli algoritmi di ottimizzazione che abbiamo utilizzato per confrontare il calcolo del minimo della funzione media di Fréchet sui modelli dello spazio iperbolico descritti nel capitolo precedente, ovvero Disco di Poincare ed Iperboloide, sfrutteremo il fatto che questi due modelli sono tra di loro conformi, ovvero che esiste una mappa conforme che li lega, faremo vedere se uno dei due modelli è effettivamente conveniente da utilizzare.

4.1 Algoritmi e Pseudocodice

In tale sezione vedremo lo pseudocodice dei metodi utilizzati per i nostri esperimenti, descriveremo quattro algoritmi, di cui due sono algoritmi di prim'ordine **passo fisso** e **armijo**, ovvero che utilizzano informazioni solamente sul gradiente nel punto per decidere il passo e la direzione dell'iterazione, gli altri due **Barzilai-Borwein** ed **LBFGS - Limited memory BFGS** sono algoritmi di quasi Newton e perciò hanno accesso ad informazioni di approssimazione al secondo ordine approssimando la matrice hessiana, sfruttando l'equazione delle secanti. Tutti gli algoritmi si basano sul calcolo del gradiente della funzione da minimizzare, in tal caso la derivata della media di frechet che possiamo calcolare tramite la derivata riemanniana della funzione distanza esplicitata sia per il disco di Poincaré che per l'iperboloide nella sezione dedicata alle varietà utilizzate.

4.1.1 Passo fisso

L'algoritmo a Passo fisso è un algoritmo del primo ordine molto elementare, la direzione scelta è l'opposta della direzione del gradiente, tale algoritmo implementato su una varietà differenziabile necessita solamente del gradiente riemanniano della funzione da minimizzare, di una retrazione e di un parametro α che denota il passo fisso applicato ad ogni iterazione.

```
Algorithm 2: Fixed lenght step size Algorithm

Input: Manifold M; funzione costo f differenziabile definita su M; retraction R; scalare \alpha > 0; initial iterate x^0 \in M

Output: Sequenza \{x^k\}

for k = 0, 1, 2, ... do

d_k \leftarrow -\alpha g^k; con g^k gradiente della funzione al passo k.
x^{k+1} \leftarrow R_{x_k}(d_k)
end
```

4.1.2 Armijo

L'algoritmo di Armijo è anche esso un algoritmo del primo ordine, la direzione scelta è l'opposta della direzione del gradiente, per la selezione del passo si basa sul calcolo del punto di armijo riemanniano, descritto nella sezione dedicata all'ottimizzazione su varietà, per poter essere eseguito necessita, anche esso, del gradiente riemanniano della funzione da minimizzare, di una retrazione e di tre parametri $\gamma \in (0,1)$, $\beta \in (0,1)$ e $\lambda > 0$. Solitamente il parametro s deve essere preso ad ogni iterazione necessario per effettuare il giusto rescaling di d_k per semplicità di sperimentazione abbiamo deciso di assumere tale parametro fisso.

```
Algorithm 3: Armijo Algorithm
```

Input: Manifold M; funzione costo f differenziabile definita su M; retrazione R; scalari $\gamma \in (0,1)$, $\sigma \in (0,1)$, $\lambda > 0$; initial iterate $x^0 \in M$

Output: Sequenza $\{x^k\}$

for k = 0, 1, 2, ... do

Trovare il più piccolo h = 0, 1, ..., tale per cui

$$f(R_{x^k}(\sigma^h \lambda d_k)) \le f(x^k) + \gamma \sigma^h \lambda \langle g^k, d_k \rangle_{x^k};$$

con g^k gradiente della funzione al passo k. $x^{k+1} \leftarrow R_{x_k}(-\sigma^h \lambda g^k)$.

end

4.1.3 Barzilai-Borwein

L'algoritmo di Barzilai-Borwein è un metodo quasi Newton e si basa sulla soluzione, per $k \ge 1$, del problema dei minimi quadrati, che ci permette di avere ricavare informazioni sulla matrice hessiana, quindi del secondo ordine.

$$\min_{t} \parallel s_k t - y_k \parallel_2$$

con $s_k = x^{k+1} - x^k$ ed $y_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$, il quale, assumendo che $x^{k+1} \neq x^k$ ha un'unica soluzione $t = \frac{s_k' y_k}{s_k' s_k}$. Quando $s_k' y_k > 0$ il passo viene scelto come.

$$a_{k+1}^{BB} = \frac{s_k' s_k}{s_k' y_k}$$

Per tradurre lalgoritmo dalla sua definizione su spazio euclideo in una versione compatibile con ottimizzazione su varietà differenziabili dobbiamo andare a ridefinire s_k ed y_k . Al passo k+1, l'hessiana è una mappa lineare da $T_{x^{k+1}}M$ a $T_{x^{k+1}}M$ perciò

considereremo il vettore $-\alpha^k g^k \in T_{x^k} M$ e lo trasporteremo in $T_{x^{k+1}} M$, perciò

$$s_k = \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(-\alpha^k g^k)$$

.

Per ottenere y_k dobbiamo sottrarre due gradienti appartenenti a due differenti spazi tangente, perciò

 $y_k = g^{k+1} - \mathcal{T}_{r^k \to r^{k+1}}(g^k)$

•

Mentre per quanto riguarda il prodotto scalare utilizzeremo quello riemanniano, quindi

$$a_{k+1}^{BB} = \frac{\langle s_k, s_k \rangle_{x^{k+1}}}{\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}}}$$

•

Algorithm 4: Barzilai-Borwein Algorithm

Input: Manifold M; funzione costo f differenziabile definita su M; retrazione R trasporto vettoriale \mathcal{T} ; scalari $\alpha_{max} > \alpha_{min} > 0$, $\alpha_0^{BB} \in [\alpha_m in, \alpha_m ax]$; punto di partenza $x^0 \in M$

Output: Sequenza $\{x^k\}$

$$g^0 \leftarrow \nabla^{(R)} f(x^0).$$

for
$$k = 0, 1, 2, ...$$
 do

$$x^{k-1} \leftarrow R_{x^k}(-a_k^{BB}g^k).$$

$$f_{k+1} \leftarrow f(x^{k+1}), g^{k+1} \leftarrow \nabla^{(R)}f(x^{k+1}).$$

$$s_k \leftarrow \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(-\alpha^k g^k).$$

$$y_k \leftarrow g^{k+1} - \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(g^k).$$

$$\tau_{k+1} \leftarrow \frac{\langle s_k, s_k \rangle_{x^{k+1}}}{\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}}}.$$

$$\begin{cases} \alpha_{k+1}^{BB} = \min\{\alpha_{max}, \max\{\tau_{k+1}, \alpha_{min}\}\}\} & if\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}} > 0. \\ \alpha_{k+1}^{BB} = \alpha_m ax & otherwise \end{cases}$$

end

Nella nostra implementazione dell'algoritmo **Riemannian Barzilai-Borwein** abbiamo deciso di non applicare valori di riscalamento, tramite ricerca lineare esatta o non, al valore α_k^{BB} , per motivazioni sperimentali sarebbe stato computazionalmente più oneroso ed alcuni esperimenti avrebbero richiesto più tempo per essere eseguiti.

4.1.4 LBFGS

L-BFGS è un algoritmo di quasi Newton e differisce dalla sua versione originale RBFGS nel calcolo della direzione $d_k = -H_k d_k$, la quale approssima la direzione di Newton (H_k approssima l'inversa della matrice hessiana). Nella presente andremo a descrivere una delle implementazioni di L-BFGS chiamata **two loop recursion**. Definiamo dapprima l'algoritmo nella sua versione euclidea, assumiamo di avere in memoria m aggiornamenti del tipo:

•
$$s_k = x^{k+1} - x^k$$
.

•
$$y_k = g^{k+1} - g^k$$
.

Definiamo $p_k = \frac{1}{y_k' s_k}$, ed H_k^0 l'approssimazione iniziale dell'inversa della matrice hessiana sulla quale l'algoritmo all'iterata k-esima si basa.

L'algoritmo fa fede al funzionamento di BGFGS per il calcolo di H_{k+1} da H_k

$$H_{k+1} = (I - p_k s_k' y_k) H_k (I - p_k y_k s_k') + p_k s_k s_k'$$

.

Per un k fissato definiamo una sequenza di vettori $q_{k-m},...,q_k$, con $q_i=(I-p_iy_is_i')q_{i+1}$ e $q_k=g^k$. Definiamo inoltre un'altra sequenza di vettori $z_{k-m},...,z_k$ con $z_i=H_iq_i$, definendo $z_{k-m}=H_k^0q_{k-m}$ e ricorsivamente $\beta_i=p_iy_i'z_i$ e $z_{i+1}=z_i+(p_is_i'q_{i+1}-\beta_i)s_i$ allora $z_k=H_kd_k$. Nella versione riemanniana faremo un forte uso del trasporto vettoriale, ridefinendo dapprima s_k ed y_k come fatto nella versione rieamanniana dell'algoritmo Barzilai-Borwain

$$s_k = \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(-\alpha^k g^k),$$

e

$$y_k = g^{k+1} - \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(g^k),$$

ridefiniamo p_k come segue

$$p_k = \frac{1}{\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}}},$$

Infine dobbiamo applicare il trasporto vettoriale a tutti i vettori s_i e y_i trasportandoli alla fine di ogni iterazione da $T_{x^k}M$ ad $T_{x^{k+1}}M$.

Algorithm 5: L-BFGS Algorithm

```
Input: Manifold M; funzione costo f differenziabile definita su M;
             retrazione R; trasporto vettoriale \mathcal{T}; scalare L > 0; punto di
             partenza x^0 \in M
Output: Sequenza \{x^k\}
\gamma_0 \leftarrow 1, l = 0;
for k = 0, 1, 2, ... do
      H_0^k \leftarrow \gamma_k id;
      q = \nabla^{(R)} f(x^k);
      for i = k - 1, k - 2, ..., l do
            \alpha_i = p_i \langle s_i, q \rangle_{x^k};
            q \leftarrow q - \alpha_i y_i;
      z \leftarrow H_0^k q \text{ for } i = l, l+1, ..., k-1 \text{ do}
          \beta = p_i \langle y_i, z \rangle_{r^k};
          z \leftarrow z + s_i(\alpha_i \beta);
      end
      \eta_k \leftarrow -z;
      x^{k+1} \leftarrow R_{x^k}(\eta_k);
     Definire: s_k = \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(\eta_k), y_k = \frac{\nabla^{(R)} f(x^{k+1})}{\sigma_k} - \mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(\nabla^{(R)} f(x^k)), p_k = \frac{1}{\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}}}, \gamma_{k+1} = \frac{\langle s_k, y_k \rangle_{x^{k+1}}}{\|y_k\|^2}, \sigma_k = \frac{\|\eta_k\|}{\|\mathcal{T}_{x^k \to x^{k+1}}(\eta_k)\|};
      Aggiungere s_k, y_k e p_k in uno storage e se k > l, allora scartare s_{l-1},
        y_{l-1} e p_{l-1} dallo storage;
      Trasportare s_l, s_{l+1}, ..., s_{k-1} e y_l, y_{l+1}, ..., y_{k-1} da T_{x^k}M a T_{x^{k+1}}M
        tramite il trasporto vettoriale \mathcal{T};
end
```

Nella nostra implementazione dell'algoritmo **L-BFGS** abbiamo deciso di non applicare valori di riscalamento, tramite ricerca lineare esatta o non, alla direzione η_k , per le stesse motivazioni riportate nella sotto-sezione precedente.

4.2 Esperimenti

Gli esperimenti effettuati ci permetteranno di confrontare il problema di ottimizzazione sulle varietà disco di Poincaré e iperboloide ed inoltre saranno utili per capire se queste due varietà sono equivalenti ed interscambiabili, non solo nella rappresentazione dello spazio iperbolico ma anche come varietà su cui effettuare ottimizzazione.

Gli esperimenti effettuati si suddividono in due parti che nel seguito descriveremo. Per effettuare gli esperimenti ci siamo muniti di un dataset di circa duecento istanze del problema, prendendo perciò un numero fissato, comune a tutte le istanze, di punti casuali sul disco (sampling effettuato sfruttando la funzione rand del file PoincareFactory della libreria manopt), per ogni istanza abbiamo calcolato il punto x^0 di partenza calcolato come la media aritmetica dei punti dell'istanza, abbiamo calcolato inoltre il punto limite tramite l'algoritmo a passo fisso con un α molto piccolo e come guardia di arresto abbiamo scelto la condizione che la norma euclidea del gradiente g^k scenda sotto un valore soglia (e.g. 10^{-8}).

Una volta ottenuto il dataset, prima di poter effettivamente confrontare gli algoritmi implementati nelle due varietà, abbiamo selezionato i parametri ottimi, uno per disco ed uno per iperboloide, per gli algoritmi che hanno necessità di dover modificare alcuni parametri, come α per il passo fisso e λ per l'algoritmo di Armijo. Per fare ciò abbiamo preso un sotto insieme del dataset iniziale e, sia per l'algoritmo a passo fisso che per Armijo, abbiamo proceduto come segue. Abbiamo è scelto un valore che rappresenta il numero di elementi in cui si suddivide lo spazio dei possibili valori del parametro di cui si deve trovare l'ottimo (e.g 100, partiremo da 0.01 ed arriveremo ad 1 in 100 passi), per ogni istanza del sotto dataset si è applicato l'algoritmo con un parametro incrementale creando per ogni istanza una sequenza i cui valori rappresentano il numero di passi che l'algoritmo con il parametro in questione impiega per convergere al limite, o divergere (numero di passi prima di arrivare ad una distanza di 10^{-4} dal limite, se diverge il numero sarà il massimo delle iterazioni possibili), una volta calcolate queste sequenze ne abbiamo fatta una media aritmetica e come parametro ottimo abbiamo scelto il valore che minimizza la sequenza media.

Per quanto riguarda la scelta di α ottimo per l'algoritmo a passo fisso abbiamo notato sperimentalmente che le sequenze di convergenza, definite per l'implementazione su disco e su iperboloide, tendono a differire di comportamento nell'intorno del punto di minimo, l'implementazione su disco tende a non convergere in meno di 100 passi per valori che si discostano di poco da punto di minimo, mentre l'implementazione su iperboloide ha un andamento differente, prima di non riuscire più a convergere in meno di 100 passi (o divergere) possiamo scortarci dal punto di minimo di un range più alto rispetto alla controparte su disco.

Contrariamente, Per quanto riguarda invece le curve definite dalla scelta di λ per l'algoritmo di Armijo, si è notato un comportamento migliore della sequenza riferita all'implementazione su disco in quanto, la sequenza tende ad essere limitata, non arrivando mai a 100, per ogni valore di λ considerato. Mentre per l'implementazione su iperboloide abbiamo notato che solo per valori di λ sopra un determinato punto abbiamo che la sequenza tende ad essere limitata.

A questo punto, avendo scelto i parametri che permettono ai nostri algoritmi di performare al meglio, possiamo procedere con il confronto. Riprendendo il dataset totale abbiamo proceduto nel seguente modo, per ogni algoritmo lo abbiamo eseguito su ogni istanza del dataset, sia per l'implementazione su disco che per quella su iperboloide, creando un punto (a, b) in \mathbb{R}^2 le cui coordinate sono a, il numero di passi per convergere al punto limite per l'implementazione su disco, b invece, il numero di passi per convergere al punto limite per l'implementazione

su iperboloide, creando cosi una nuvola di punti. Tramite tale nuvola possiamo verificare se le metodologie sono effettivamente equivalenti, riporteremo i grafici sui quali vengono plottate le nuvole di punti, in ogni grafico vengono costruite due rette di regressione su una versione ridotta della nuvola di punti, toglieremo quei punti che hanno una molteplicità bassa (e.g. sotto $\frac{1}{25}$ della cardinalità totale del dataset), la prima retta di regressione viene calcolata tramite il metodo dei minimi quadrati, la seconda invece viene calcolata tramite un algoritmo meno sensibile ai valori anomali, la regressione di Huber. Noteremo quindi che, se le rette di regressione tendono ad avere un coefficiente angolare "vicino" ad 1 le due varietà possono essere ritenute equivalenti. Riportiamo di seguito i grafici dei nostri esperimenti, verrà riportato, per ogni grafico, un valore medio di convergenza per il disco e per l'iperboloide, tale valore rappresenterà un ulteriore indice di confronto.

Durante le nostre sperimentazioni ci siamo resi conto che il grafico relativo all' algoritmo di Barzilai-Borwein tende ad avere i coefficienti delle rette di regressione "molto vicini" a 1, l'algoritmo L-BFGS differisce di molto a seconda del dataset considerato, questo può essere dovuto alla scelta di non aver applicato valori di riscalamento alla direzione H_kg_k tornata tramite il metodo "twoloop recursion", infine i grafici relativi all'algoritmo di Armijo e l'algoritmo a passo fisso tendono ad avere rette di regressione simili alla bisettrice se il minimo trovato dal parametro ottimo nella prima parte degli esperimenti coincide tra l'implementazione su disco e quella su iperboloide, questo dipende dal numero di punti in cui suddividiamo il range di valori testati del parametro da considerare, essendo l'implementazione su disco molto sensibile, ma dipende anche dal dataset preso in considerazione.

5 Appendice

5.1 Varietà

Sia M un insieme. Una bigiezione ϕ di un sottoinsime U di M in un sottoinsieme aperto di R^d è chiamata mappa d-dimensionale dell'insieme U. Data una carta (U,ψ) e $x\in U$ gli elementi di $\psi(x)\in R^d$ sono le coordinate di x nella carta (U,ψ) . Un Atlas (A) di M in R^d è un insieme di carte (U_a,ψ_a) dell'insieme M tali che:

- $\bigcup_a U_a = M$.
- Per ogni coppia α, β con $U_{\alpha} \cap U_{\beta} \neq \emptyset$ gli insiemi $\psi_{\alpha}(U_{\alpha} \cap U_{\beta})$ e $\psi_{\beta}(U_{\alpha} \cap U_{\beta})$ sono sottoinsiemi aperti di R^d ed il cambio di coordinate $\psi_{\alpha} \circ \psi_{\beta}^{-1} : R^d \to R^d$ è smooth.

Dato un'atlas A, sia A^+ l'insieme delle carte (U, ψ) tali che $A \bigcup \{(U, \psi)\}$ è ancora un'atlas. A^+ è un'atlas massimale generato da A. Un'atlas massimale dell'insieme M è chiamato struttra differenziabile su M.

Definizione 9 Una varietà d-dimensionale è una coppia (M, A^+) , dove M è un insieme e A^+ è un atlas massimale su M in R^d , tale che la topologia indotta da A^+ è di hausdorff.

Data una carta ψ su M, l'inverso ψ^{-1} è chiamata parametrizzazione locale di M.

5.1.1 Vettori Tangenti

Riprendendo il concetto di derivata direzionale possiamo generalizzarla per un funzione f definita su un manifold, sustituendo $t\mapsto (x+t\eta)$ con una curva su M attraverso $x\in M$ (punto di derivazione) $(\gamma(0)=x)$ questo porta ad una derivata direzionale ben definita $\frac{\partial f(\gamma(t))}{\partial t}|_{t=0}$. Formalmente, sia M una varietà e γ una mappa differenziabile $\gamma:R\to M|t\mapsto \gamma(t)$ detta curva in M, data, una funzione f a valori reali definita su M, la funzione $f\circ\gamma:t\mapsto f(\gamma(t))$ è una funzione differenziabile da R in R con una ben definita deerivata.

Sia $x \in M$; $\gamma(0) = x$ allora $F_x(M)$ è l'insieme delle funzioni reali differenziabili definite in un intorno di x. Il mapping $\dot{\gamma}(0)$ da $F_x(M)$ in R è definito come: $\dot{\gamma}(0)f = \frac{\partial f(\gamma(t))}{\partial t}|_{t=0}$ con $f \in F_x(M)$; é chiamato vettore tangente alla curva γ in t=0.

Definizione 10 (Vettore Tangente) Un vettore tangente ϵ_x ad una varietà M in un punto $x \in M$ è una mappa da $F_x(M)$ in R tale ceh esiste una curva γ a valori in M con $\gamma(0) = x$ e che soddisfa,

$$\epsilon_x f = \gamma(0) f = \frac{\partial f(\gamma(t))}{\partial t}|_{t=0} \quad \forall f \in F_x(M).$$

Tale curva γ è detta realizzare il vettore tangente ϵ_x

Definizione 11 (Spazio Tangente) Uno spazio tangente ad M in x denominato come T_xM è l'insieme di tutti i vettori tangenti ad M in x. Questo insieme ammette una struttura di spazio vettoriale come segue: date $\dot{\gamma}_1(0)$ e $\dot{\gamma}_2(0)$ in T_xM e a,b in R allora $(a\dot{\gamma}_1(0) + b\dot{\gamma}_2(0))f = a(\dot{\gamma}_1(0)f) + b(\dot{\gamma}_2(0)f)$

Lo spazio tangente T_xM mette a disposizione un'approssimazione locale di spazio vettoriale della varietà. Perciò tramite le Retrazioni possiamo effettuare ottimizzazione sullo spazio vettoriale T_xM .

Definizione 12 (Tangent Bundle) Data una varietà M, sia TM l'insieme di tutti i vettori tangenti ad M.

$$TM = \bigcup_{x \in M} T_x M.$$

Sia $P:M\to N$ una mappa liscia tra due varietà M ed N. sia ϵ_x un vettore tangente in un punto x di M, si può far vedere che la mappa $DP(x)[\epsilon_x]$ da $F_{P(x)}(N)$ in R è

definita da:

$$(DP(x)[\epsilon_x])f = \epsilon_x(f \circ P)$$

è un vettore tangente ad N in P(x).

La mappa $DP(X): T_xM \to T_{P(x)}N|\epsilon_x \mapsto DP(x)[\epsilon_x]$ è una mappa lineare chiamata differenziale di P in x.

5.1.2 Metriche distanze e e gradienti Riemanniani

I vettori tangenti ad una varietà generalizzano la nozione di derivata direzionale. Questo può essere fatto munendo lo spazio tangente T_xM con un prodotto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_x$ bilineare, definito positivo e simmetrico. Il prodotto interno induce una norma $\| \epsilon_x \|_x = \sqrt{\langle \epsilon_x, \epsilon_x \rangle_x}$ sun T_xM . Una varietà il cui spazio tangente è munito di un prodotto interno prende il nome di varietà riemanniana (M,g) con g metrica riemanniana.

La lunghezza di una curva $\gamma:[a,b]\to M$ in una varietà riemanniana (M,g) è definita da,

$$L(\gamma) = \int_{a}^{b} \sqrt{g(\gamma(t), g(\gamma(t)))}.$$

La distanza riemanniana in una varietà riemanniana connessa (M,g) è $dist: MxM \to R|dist(x,y) \mapsto inf_{\gamma \in \Gamma}(L(\gamma))$, dove Γ è l'insieme di tutte le curve in M che connettono x ed y.

Sia f la solita funzione liscia definita su (M,g), il gradiente di f in x è definito come l'elemento di T_xM che soddisfa,

$$\langle f(x), \epsilon \rangle_x = Df(x)[\epsilon].$$

Sia M una sottovarietà immersa di una varietà riemanniana \hat{M} siccome ogni spazio tangente T_xM può essere trattato come sottospazio di $T_x\hat{M}$ la metrica \hat{g} di \hat{M} induce una metrica g su M, $g_x(\epsilon,c)=\hat{g}_x(\epsilon,c)$ con $\epsilon,c\in T_xM$, perciò M è una sotto varietà riemanniana.

5.2 Topologia

Una topologia su un insieme X è una collezione T di sottoinsiemi di X chiamati insiemi aperti, tali che:

- $X \in \emptyset$ appartengono a T.
- L'unione di elementi di qualsiasi sotto
insieme di T è in ${\cal T}.$
- L'intersezione di elementi di qualsiasi sotto collezione di T è in T.

Uno spazio topologico è una coppia (X,T) dove X è un insieme e T è una topologia su X.

Definizione 13 (Hausdorff) Un insieme $X \in T_2$ o di Hausdorff se ogni coppia di punti distinti di X hanno un intorno distinto.

Se X è di Hausdorff allora ogni sequenza di punti di X converge ad al più un punto di X.

5.3 Definizioni Utili

Definizione 14 (Positività) Sia $A \in R^{n*n}$ è definita positiva se è simmetrica e se v'Av > 0 se v è un vettore $\in R^n - 0$, con v = 0 è diretto che v'Av = 0.

Definizione 15 (Convessità) Una funzione $f: \Omega \to R$ con $\Omega \leq V$, V (spazio vettoriale) allora è definita convessa se: $(f((\lambda)v + (1-\lambda)w) \leq \lambda f(v) + (1-\lambda)f(w)$, $per \lambda \in [0;1]$ e $v,w \in \Omega$.

Definizione 16 (Derivate Parziali) Data una funzione $f:V\to R$, V (spazio vettoriale), allora una derivata parziale su $x\in V$ è definita come:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x + he_i) - f(x)}{h};$$

con x_i componente i-esima di x ed e_i i-esimo vettore della base canonica. Se una funzione è differenziabile in x allora tutte le derivate parziali esistono in x.

Definizione 17 (Punto di accumulazione) Diciamo che $x \in R$ è un punto di accumulazione per un insieme $E \subset R$ se comunque scelto un intorno $B(x, \epsilon)$, risulta che $B(x, \epsilon)$ contiene almeno un punto di E diverso da x.

Definizione 18 (Gradiente) Consideriamo una funzione f definita su un insieme aperto $A \subset \mathbb{R}^n$ e sia $x \in A$ se esistono in x le derivate parziali rispetto ad $\{x_i\}_{i=1...n}$ allora è possibile costruire un vettore che ha per componenti le derivate perziali, perciò il gradiente è definito come.

$$\nabla f = \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, ..., \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right].$$

Inoltre per il teorema della formula del gradiente sappiamo che, dato un versore v esiste la derivata direzionale f_v in x e che $f_v(x) = \nabla f(x) \cdot v$.

5.3.1 Teorema di Taylor

Il teorema di Taylor è un teorema che fornisce una sequenza di approssimazioni di una funzione differenziabile attorno ad un dato punto mediante i polinomi di taylor, ovvero polinomi i cui coefficienti dipendono solo dalle derivate della funzione nel punto. Diamo un esempio pratico di approssimazione di taylor del secondo ordine di una funzione a due variabili.

$$f(x_0 + h, y_0 + k) = f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)h + f_y(x_0, y_0)k + \frac{1}{2}[f_{xx}(x_0, y_0)h^2 + f_{xy}(x_0, y_0)hk + f_{yy}(x_0, y_0)k^2] + R(h, k).$$

con $R(h, k) \in o(||(h, k)||^2)$.

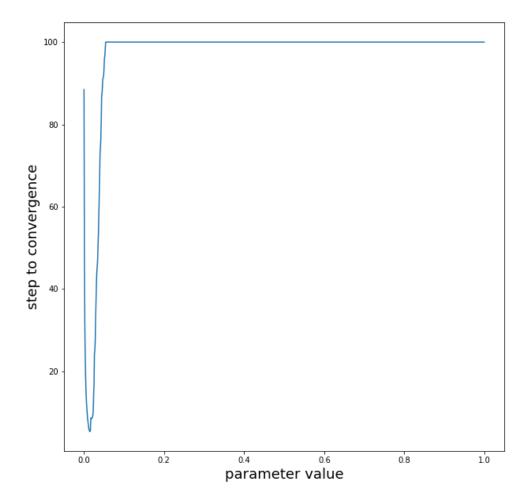


Figure 2: Sequenza relativa alla convergenza del'algoritmo a passo fisso implementato su disco, notiamo come sia stretto l'intorno del parametro ottimale tale per cui è garantita convergenza sotto i cento passi, i valori associato sono: Punto di minimo 5.35, valore di convergeza minimo 0.016.

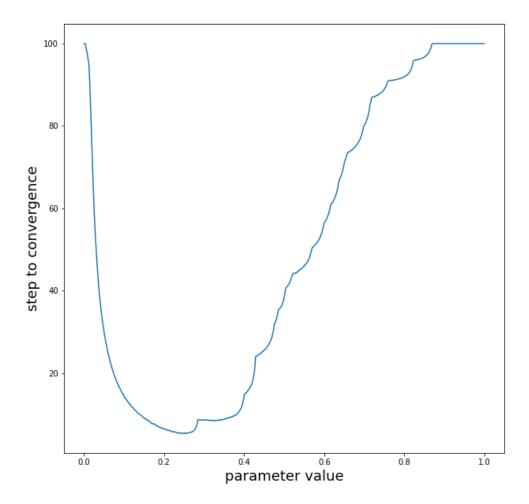


Figure 3: Sequenza relativa alla convergenza del'algoritmo a passo fisso implementato su iperboloide, notiamo come sia più ampio l'intorno del parametro ottimale tale per cui è garantita convergenza sotto i cento passi, rispetto all'implementazione su disco, i valori associato sono: Punto di minimo 5.3, valore di convergeza minimo 0.244.

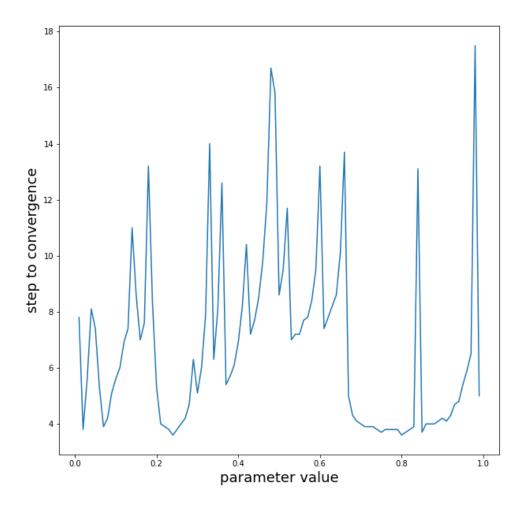


Figure 4: Sequenza relativa alla convergenza del'algoritmo di Armijo implementato su disco, notiamo come la sequenza sia limitata superiormente per ogni valore del parametro. Punto di minimo , valore di convergeza minimo .

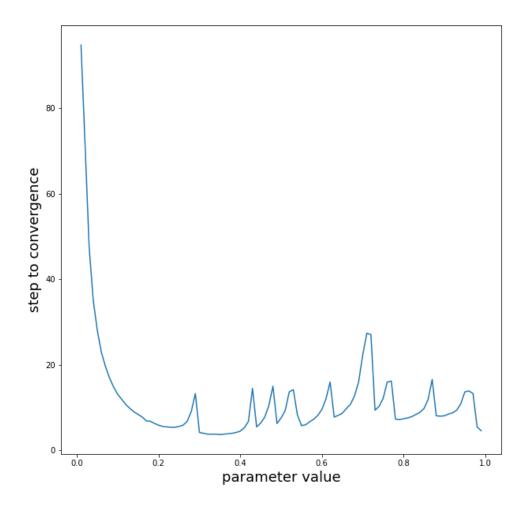


Figure 5: Sequenza relativa alla convergenza del'algoritmo di Armijo implementato su iperboloide, notiamo come la sequenza sia limitata superiormente solo per valori del parametro superiori ad un determinato valore. Punto di minimo , valore di convergeza minimo .

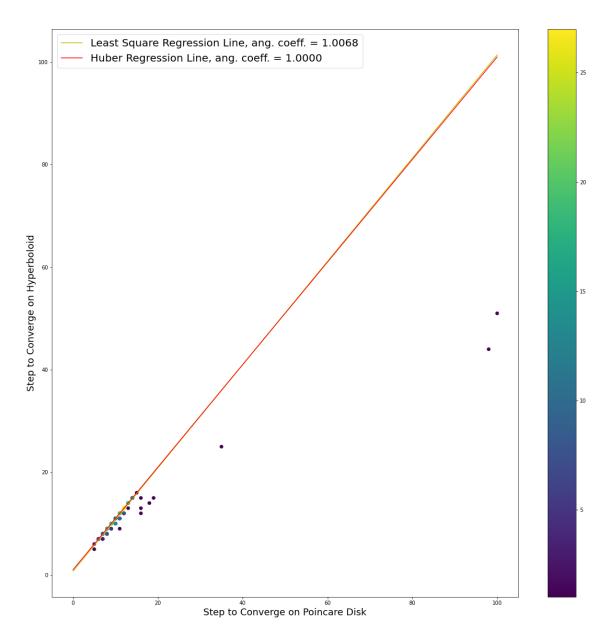


Figure 6: Nuvola di punti relativa all'algoritmo a passo fisso, notiamo che i punti generati tendono a giacere sulla bisettrice, ciò indica un equvalenza tra le due implementazioni. Valore medio di convergenza sul disco 11.515, valore medio di convergenza su iperboloide 11.58.

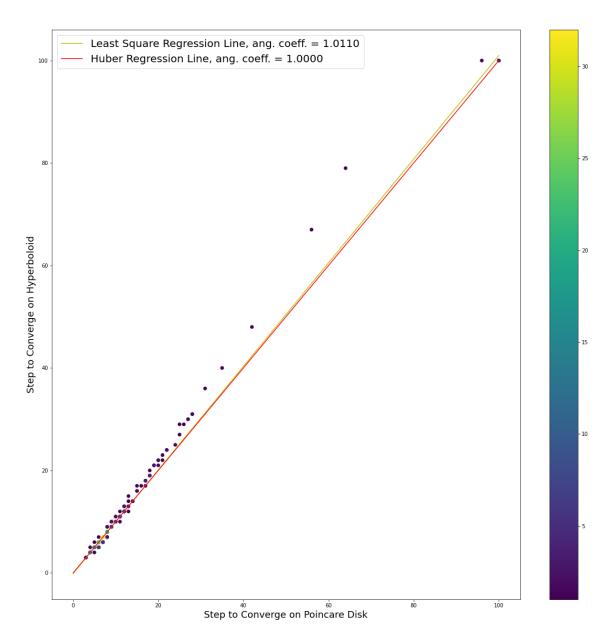


Figure 7: Nuvola di punti relativa all'algoritmo di Armijo, notiamo che i punti generati tendono a giacere sulla bisettrice, ciò indica un equvalenza tra le due implementazioni. Valore medio di convergenza sul disco 12.07, valore medio di convergenza su iperboloide 12.555.

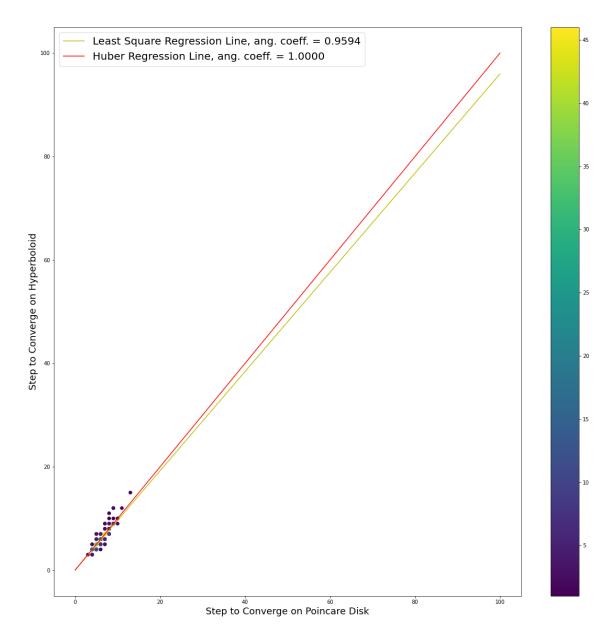


Figure 8: Nuvola di punti relativa all'algoritmo di Barzilai-Borwein, notiamo che i punti generati tendono a giacere sulla bisettrice, ciò indica un equvalenza tra le due implementazioni. Valore medio di convergenza sul disco 6.205, valore medio di convergenza su iperboloide 6.2.

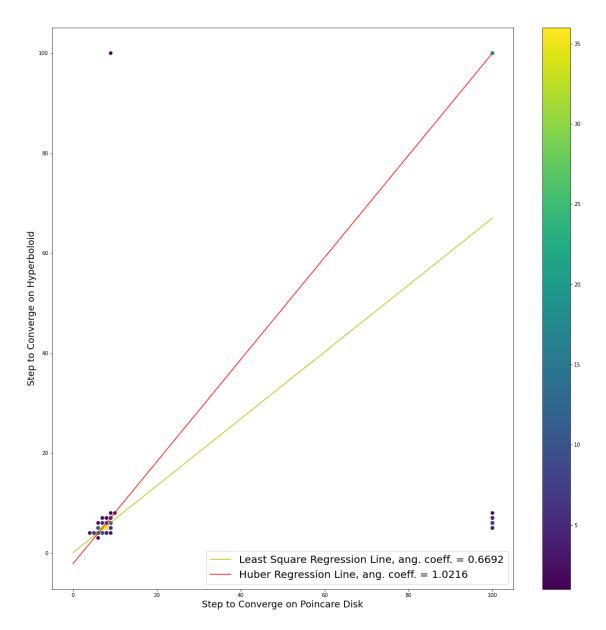


Figure 9: Nuvola di punti relativa all'algoritmo di L-BFGS, come accennato nella sezione dedicata, l'algoritmo tende alle volte a generare una nuvola di punti non propriamente lineare, nonostante in tal caso la retta di regressione di Huber è pressochè lineare, ciò potrebbe essere sintomo di un'intrinseca equivalenza tra le due implementazioni. Valore medio di convergenza sul disco 25.365, valore medio di convergenza su iperboloide 16.05.