

(curs 14 - S9)

10.4. Aplicatii ale DVS

- în această secțiune, prezentăm câteva proprietăți utile ale DVS și indicăm unele dintre utilizările lor pe scară largă
- de exemplu, DVS se dovedește a fi cea mai bună metodă de a afla rangul unei matrici
- determinantul și inversa unei matrici pătratice, dacă există, pot fi găsite folosind DVS
- probabil cele mai folosoitoare aplicații ale DVS rezultă din proprietatea de aproximare de rang inferior
- presupunem în cele ce urmează că $A = USV^T$ este descompunerea valorilor singulare
- rangul unei matrici $m \times n A$ este numărul de rânduri (sau, echivalent, de coloane) liniar independente ale matricii

Faptul 1

Rangul matricii $A = USV^T$ este egal cu numărul de intrări nenule din S .

- deoarece U și V^T sunt matrici inversabile, $\text{rang}(A) = \text{rang}(S)$, acesta din urmă fiind numărul de intrări diagonale nenule ale matricii S

Faptul 2

Dacă A este o matrice $n \times n$, atunci $|\det(A)| = s_1 \cdots s_n$.

- deoarece $U^T U = I$ și $V^T V = I$, determinantii lui U și V^T sunt 1 sau -1 , datorită faptului că determinantul unui produs este egal cu produsul determinantelor
- Faptul 2 rezultă din factorizarea $A = USV^T$

Faptul 3

Dacă A este o matrice inversabilă $m \times m$, atunci $A^{-1} = VS^{-1}U^T$.

- din Faptul 1, S este inversabilă, ceea ce înseamnă că toți $s_i > 0$
- acum, Faptul 3 rezultă din aceea că, dacă A_1, A_2 , și A_3 sunt matrici inversabile, atunci $(A_1 A_2 A_3)^{-1} = A_3^{-1} A_2^{-1} A_1^{-1}$
- de exemplu, DVS

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

arată că matricea inversă este

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{2} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

10.4.1. Proprietăți ale DVS

Faptul 4

Matricea $m \times n A$ poate fi scrisă ca suma de matrici de rangul unu

$$A = \sum_{i=1}^r s_i u_i v_i^T, \quad (2)$$

unde r este rangul lui A , și u_i și v_i sunt coloanele i ale lui U și, respectiv, V .

$$\begin{aligned} A &= USV^T = U \begin{bmatrix} s_1 & & \\ & \ddots & \\ & & s_r \end{bmatrix} V^T \\ &= U \left(\begin{bmatrix} s_1 \\ & s_2 \\ & & \ddots \\ & & & s_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & s_r \end{bmatrix} \right) V^T \\ &= s_1 u_1 v_1^T + s_2 u_2 v_2^T + \cdots + s_r u_r v_r^T. \end{aligned}$$

- Faptul 4 este proprietatea de aproximare de rang inferior a DVS
- cea mai bună aproximare în sensul celor mai mici pătrate a matricii A de rang $p \leq r$ este dată de primii p termeni din (2)

Exemplul 1

- găsiți cea mai bună aproximare de rang unu a matricii $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix}$
- scriind (2), obținem

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \\ &= 2 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ \sqrt{5} & \sqrt{5} \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ \sqrt{5} & \sqrt{5} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{2}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{8}{5} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{2}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} & -\frac{1}{10} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

un fel de eroare ⁽³⁾

- observăm cum matricea inițială este despărțită într-o contribuție mai mare plus o contribuție mai mică, datorită mărimilor diferite ale valorilor singulare
- cea mai bună aproximare de rang unu este dată de prima matrice de rang unu

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{8}{5} \end{bmatrix},$$

în timp ce a doua matrice oferă mici corecții

- aceasta este ideea de bază din spatele reducerii dimensionalității și al aplicațiilor în compresie ale DVS

- următoarele două subsecțiuni introduc două utilizări ale DVS
- în reducerea dimensionalității, accentul se pune pe aproximarea unei colecții mari de vectori multidimensionali printr-o colecție de vectori care generează mai puține dimensiuni
- cealaltă aplicație este compresia cu pierdere de informații, care reduce cantitatea de informații necesare pentru reprezentarea aproximativă a unei matrici
- ambele se bazează pe Faptul 4 despre aproximarea de rang inferior

$$A = U \cdot S V^T$$

10.4.2. Reducerea dimensionalității

- ideea este de a proiecta datele într-o dimensiune inferioară
- presupunem că a_1, \dots, a_n reprezintă o colecție de vectori m -dimensionali
- în aplicații mari consumatoare de date, m este mult mai mic decât n
- scopul reducerii dimensionalității este de a înlocui a_1, \dots, a_n cu n vectori care generează $p < m$ dimensiuni, minimizând eroarea asociată cu realizarea acestui proces
- de obicei, pornim cu o mulțime de vectori cu media egală cu zero
- dacă această proprietate nu este îndeplinită, putem să scădem media vectorilor pentru a o obține, iar apoi, la sfârșit, să adunăm media înapoi la rezultat
- DVS oferă o modalitate simplă de a realiza reducerea dimensionalității
- considerăm vectorii de date ca fiind coloanele unei matrici $m \times n$
 $A = [a_1 | \dots | a_n]$, și calculăm descompunerea valorilor singulare
 $A = USV^T$
- fie e_j vectorul j al bazei elementare (care are toate intrările zero, cu excepția intrării j , care este 1)
- atunci $Ae_j = a_j$

- folosind aproximarea de rang p

$$A \approx A_p = \sum_{i=1}^p s_i u_i v_i^T$$

din Faptul 4, putem proiecta a_j pe spațiul p -dimensional generat de coloanele u_1, \dots, u_p ale lui U astfel:

$$a_j = Ae_j \approx A_p e_j. \quad (4)$$

- deoarece înmulțirea unei matrici cu e_j reține doar coloana j a matricii, putem să descriem mai eficient descoperirea anterioară, după cum urmează:
- spațiul $\langle u_1, \dots, u_p \rangle$ generat de vectorii singulari stângi u_1, \dots, u_p este cel mai bun subspațiu de aproximare de dimensiune p pentru a_1, \dots, a_n în sensul celor mai mici pătrate, și proiecțiile ortogonale ale coloanelor a_i ale lui A pe acest spațiu sunt coloanele lui A_p
- cu alte cuvinte, proiecția unei colecții de vectori a_1, \dots, a_n pe cel mai bun subspațiu p -dimensional în sensul celor mai mici pătrate este exact cea mai bună matrice de aproximare de rang p A_p

Exemplu 2

- găsiți cel mai bun subspațiu unu-dimensional pentru vectorii de date $[3, 2]^T, [2, 4]^T, [-2, -1]^T, [-3, -5]^T \rightarrow A = [a_1 | a_2 | a_3 | a_4]$
- cei patru vectori de date, prezentați în Figura 1(a), indică aproximativ același subspațiu unu-dimensional
- vrem să găsim acest subspațiu, și anume acela care minimizează suma erorilor pătratice de la vectorii proiectați la acel subspațiu, iar apoi să găsim vectorii proiectați
- scriem vectorii de date ca fiind coloanele matricii de date

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & -2 & -3 \\ 2 & 4 & -1 & -5 \end{bmatrix},$$

$$A = USV^T$$

și găsim DVS a sa, care, cu patru zecimale exacte, este V^T

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0.5886 & -0.8084 \\ 0.8084 & 0.5886 \end{bmatrix}}_{U} \begin{bmatrix} 8.2809 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1.8512 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.4085 & 0.5327 & -0.2398 & -0.7014 \\ -0.6741 & 0.3985 & 0.5554 & -0.2798 \\ 0.5743 & -0.1892 & 0.7924 & -0.0801 \\ 0.2212 & 0.7223 & 0.0780 & 0.6507 \end{bmatrix}$$

- cel mai bun subspațiu unu-dimensional, prezentat ca o linie punctată în Figura 1(b), este generat de către $u_1 = [0.5886, 0.8084]^T$
- reducerea la un subspațiu de dimensiune $p = 1$ înseamnă să luăm $s_2 = 0$ și să reconstituim matricea
- cu alte cuvinte, $A_1 = US_1 V^T$, unde

$$S_1 = \begin{bmatrix} 8.2809 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \rightarrow$$

se ia prima col, restul 0

- prin urmare, coloanele matricii

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1.9912 & 2.5964 & -1.1689 & -3.4188 \\ 2.7346 & 3.5657 & -1.6052 & -4.6951 \end{bmatrix} \quad (5)$$

sunt cei patru vectori proiectați care corespund celor patru vectori de date inițiali

- ei sunt prezentați în Figura 1(b)

e_j

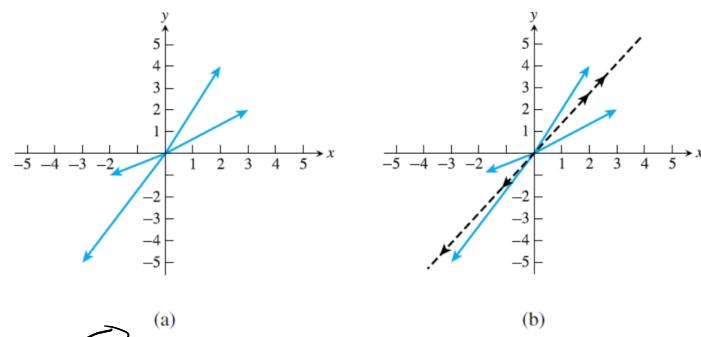


Figura 1: Reducerea dimensionalității prin DVS. (a) Patru vectori de date care trebuie proiectați pe cel mai bun subspațiu unu-dimensional. (b) Linia punctată reprezintă cel mai bun subspațiu. Săgețile arată proiecțiile ortogonale pe acest subspațiu.

10.4.3. Compresia

- Faptul 4 poate fi folosit de asemenea pentru a compresa informația dintr-o matrice
- observăm că fiecare termen din dezvoltarea de rang unu din Faptul 4 este specificat prin folosirea a doi vectori u_i, v_i și încă a unui număr s_i
- dacă A este o matrice $n \times n$, putem să încercăm o compresare cu pierdere de informații a lui A prin renunțarea la termenii de la sfârșitul sumei din Faptul 4, și anume cei cu valori s_i mai mici
- fiecare termen din dezvoltare necesită $2n + 1$ numere pentru stocare sau transmisie
- de exemplu, dacă $n = 8$, matricea este specificată prin 64 de numere, dar putem să transmitem sau să stocăm primul termen din dezvoltare folosind doar $2n + 1 = 17$ numere
- dacă mare parte din informație este captată de primul termen—de exemplu, dacă prima valoare singulară este mult mai mare decât restul—s-ar putea face o economie de 75 de procente în spațiu de stocare folosind această metodă
- ca un exemplu, ne întoarcem la blocul de pixeli de dimensiune 8×8 prezentat în Figura 6 din Cursul 12
- după ce scădem 128 pentru a centra valorile pixelilor în jurul lui 0, matricea este dată în ecuația (15) din Cursul 12
- valorile singulare ale acestei matrici 8×8 sunt după cum urmează:

387.78
216.74
83.77
62.69
34.75
21.47
10.50
4.35

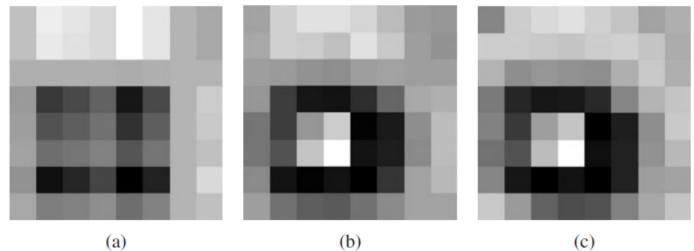


Figura 2: Rezultatul compresiei și decompresiei prin DVS. Numărul de valori singulare reținute: (a) $p = 1$ (b) $p = 2$ (c) toate.

- blocul inițial este prezentat în Figura 2(c), împreună cu versiunile compresate în (a) și (b)
- Figura 2(a) corespunde înlocuirii matricii cu primul termen din dezvoltarea din Faptul 4, cea mai bună aproximare de rang unu a matricii de pixeli
- după cum am remarcat anterior, obținem astfel o compresie de aproximativ 4 : 1
- în Figura 2(b), doi termeni sunt folosiți, pentru a obține un raport de compresie de aproximativ 2 : 1
- desigur, simplificăm aici discuția prin aceea că nu folosim cuantizarea
- ar ajuta să stocăm coeficienții corespondanți unor valori singulare mai mici cu precizie mai mică, după cum am făcut în Capitolul 9

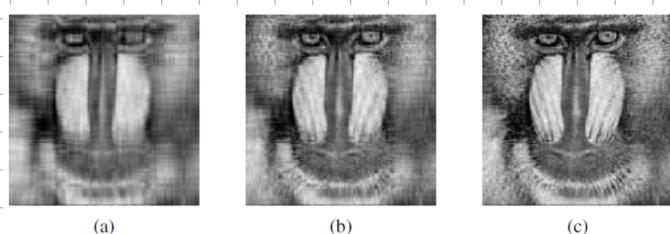


Figura 3: Rezultatul compresiei și decompresiei prin DVS. Numărul de valori singulare reținute: (a) $p = 8$ (b) $p = 16$ (c) $p = 32$.

- fotografie în tonuri de gri din Figura 5 din Cursul 12 este o imagine de dimensiune 256×256 de pixeli
- putem de asemenea să aplicăm Faptul 4 întregii matrici, după ce scădem 128 din valoarea fiecărui pixel
- cele 256 de valori singulare ale matricii variază ca mărime de la 8108 la 0.46
- Figura 3 prezintă imaginea reconstruită care rezultă din păstrarea a p termeni ai dezvoltării de rang unu din Faptul 4
- pentru $p = 8$, doar $8(2(256) + 1) = 4104$ numere trebuie să fie stocate, comparat cu $(256)^2 = 65536$ valori initiale ale pixelilor, un raport de compresie de aproximativ 16 : 1
- în Figura 3(c), unde 32 de termeni sunt păstrați, raportul de compresie este de aproximativ 4 : 1

10.4.4. Calcularea DVS

- dacă A este o matrice reală simetrică, DVS se reduce la calculul valorilor proprii discutat mai devreme în acest capitol
- în acest caz, vectorii proprii unitari formează o bază ortogonală
- dacă definim o matrice V care conține vectorii proprii unitari sub formă de coloane, atunci $AV = US$ exprimă ecuația vectorilor proprii, unde S este o matrice diagonală care conține valorile absolute ale valorilor proprii și U este aceeași cu V , dar cu semnul coloanei schimbat dacă valoarea proprie este negativă
- deoarece U și V sunt matrici ortogonale,

$$A = USV^T$$

este o descompunere a valorilor singulare pentru matricea A

- pentru o matrice generală, nesimetrică $m \times n A$, există două abordări computaționale distințe pentru determinarea DVS
- prima și cea mai evidentă metodă este de a forma $A^T A$ și de a-i găsi valorile proprii
- aceasta dezvăluie coloanele v_i ale lui V , și prin normalizarea vectorilor $Av_i = s_i u_i$, obținem atât valorile singulare cât și coloanele lui U
- această metodă nu este, însă, recomandată, decât pentru exemplele simple
- din fericire, există o metodă alternativă de găsire a vectorilor proprii ai matricii $A^T A$ care evită formarea produsului matricial
- considerăm matricea

$$B = \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

- observăm că B este o matrice simetrică $(m+n) \times (m+n)$
- prin urmare, are valori proprii reale și o bază de vectori proprii
- fie $[v, w]^T$ un $(m+n)$ -vector care este un vector propriu al lui B
- atunci

$$\begin{bmatrix} A^T w \\ Aw \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix},$$

sau $Av = \lambda w$

- înmulțind la stânga cu A^T , obținem

$$A^T Av = \lambda A^T w = \lambda^2 v, \quad (7)$$

ceea ce arată că v este un vector propriu al matricii $A^T A$ cu valoarea proprie corespunzătoare λ^2

- observăm că putem să determinăm valorile proprii și vectorii proprii ai matricii $A^T A$ în acest fel, fără a forma matricea $A^T A$
- metode ca algoritmul QR deplasat pot fi aplicate pentru a găsi valorile proprii, care sunt pătratele valorilor singulare, și vectorii proprii, ale căror prime n intrări sunt vectorii singulari v_i
- deși această abordare pare să dubleze dimensiunea matricii, există modalități mai eficiente de a implementa această idee (pe care nu le vom urma aici) care evită necesitatea unui spațiu de stocare suplimentar

11. Optimizarea

- optimizarea se referă la găsirea maximului sau minimului unei funcții cu valori reale, numită **funcție obiectiv**
- deoarece găsirea maximului unei funcții $f(x)$ este echivalentă cu găsirea minimului funcției $-f(x)$, este suficient să considerăm doar minimizarea în dezvoltarea metodelor computaționale

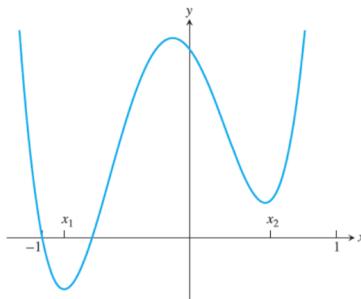


Figura 4: Problema de minimizare pentru $f(x) = 5x^4 + 3x^3 - 4x^2 - x + 2$. Soluția problemei de optimizare neconstrânsă $\min_x f(x)$ este x_1 .

- anumite probleme de optimizare necesită ca minimul funcției obiectiv să fie supus la diverse constrângeri date prin egalități și inegalități
- de exemplu, deși x_1 este minimul global al funcției din Figura 4, x_2 ar fi minimul supus constrângerii $x \geq 0$
- în particular, domeniul programării liniare consideră probleme în care funcția obiectiv și constrângerile sunt liniare
- în acest capitol, vom păstra lucrurile simple și vom considera doar optimizarea neconstrânsă
- metodele pentru optimizarea neconstrânsă formează două grupuri, depinzând dacă derivatele funcției obiectiv $f(x)$ sunt folosite sau nu
- dacă o funcție algebrică este cunoscută pentru $f(x)$, în cele mai multe cazuri, derivatele pot fi ușor determinate
- informația dată de derivate ar trebui folosită dacă este posibil, dar există mai multe motive pentru care s-ar putea să nu fie disponibilă
- în particular, funcția obiectiv ar putea să fie prea complicată, să aibă dimensiune prea mare, sau să nu fie cunoscută într-o formă care poate fi derivată
- în această secțiune, se face presupunerea că funcția obiectiv $f(x)$ poate fi evaluată pentru orice intrare x , dar derivata $f'(x)$ (sau derivatele parțiale dacă f este o funcție de mai multe variabile) nu este disponibilă
- vom discuta două metode de optimizare fără derivate: căutarea secțiunii de aur și interpolarea parabolică succesivă
- ele se aplică doar pentru funcții $f(x)$ de o variabilă scalară

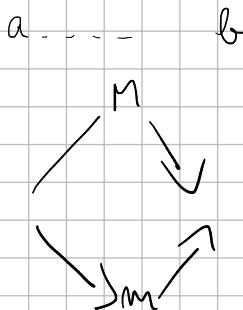
11.1.1. Căutarea secțiunii de aur

- căutarea secțiunii de aur este o metodă eficientă de găsire a minimului unei funcții $f(x)$ de o variabilă, odată ce se cunoaște un interval în care se află minimul

Definiția 1

Funcția continuă $f(x)$ se numește **unimodală** pe intervalul $[a, b]$ dacă există exact un minim sau un maxim relativ pe $[a, b]$, și f este strict descrescătoare sau crescătoare în toate celelalte puncte.

- o funcție unimodală sau crește la un maxim relativ din $[a, b]$ și apoi descrește pe măsură ce x se mișcă de la a la b , sau descrește la un minim relativ și apoi crește
- presupunem că f este unimodală și are un minim relativ pe $[a, b]$
- alegem două puncte x_1 și x_2 din interval, astfel încât $a < x_1 < x_2 < b$, după cum se arată în Figura 5 pentru cazul $[a, b] = [0, 1]$



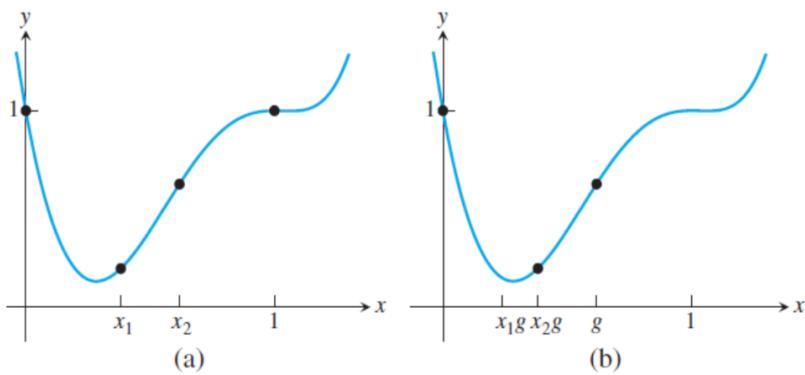


Figura 5: Căutarea secțiunii de aur. (a) Evaluăm funcția obiectiv în două puncte x_1, x_2 din intervalul curent $[0, 1]$. Dacă $f(x_1) \leq f(x_2)$, atunci noul interval va fi $[0, x_2]$. (b) În pasul următor, luăm $g = x_2$ și repetăm aceeași comparație cu x_1g și x_2g .

- vom înlocui intervalul inițial cu un interval nou, mai mic, care continuă să conțină un minim relativ, potrivit următoarei reguli: dacă $f(x_1) \leq f(x_2)$, atunci reținem intervalul $[a, x_2]$ la următorul pas
- dacă $f(x_1) > f(x_2)$, reținem intervalul $[x_1, b]$
- observăm că în ambele cazuri, noul interval conține un minim relativ al funcției unimodale f
- de exemplu, dacă $f(x_1) < f(x_2)$, după cum se arată în Figura 5, atunci, datorită presupunerii unimodale, minimul trebuie să fie la stânga lui x_2
- aceasta se întâmplă deoarece f trebuie să descrească la stânga minimului, deci $f(x_1) < f(x_2)$ înseamnă că x_2 trebuie să fie la dreapta minimului
- la fel, $f(x_1) > f(x_2)$ implică faptul că $[x_1, b]$ conține minimul
- deoarece noul interval este mai mic decât intervalul anterior $[a, b]$, am făcut un progres în localizarea minimului
- acest pas de bază este apoi repetat până când intervalul care conține minimul este cât de mic ne dorim
- metoda este asemănătoare metodei bisecției pentru localizarea rădăcinilor

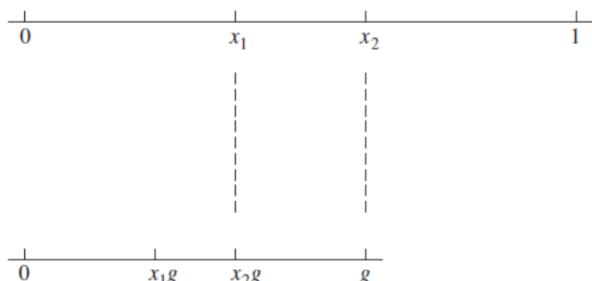


Figura 6: Alegerea proporțiilor în căutarea secțiunii de aur. Raportul dintre segmentul de sus și segmentul de jos este $1/g = (1 + \sqrt{5})/2$, secțiunea de aur. Punctele x_1 și x_2 sunt alese exact, astfel că indiferent dacă noul interval este $[0, x_2]$ sau $[x_1, 1]$, un punct poate fi refolosit ca un nou punct interior, reducând numărul de evaluări noi ale funcției obiectiv la una în fiecare pas.

$$f(x_1) \leq f(x_2) \Rightarrow [a, x_2]$$

$$f(x_1) > f(x_2) \Rightarrow [x_1, b]$$

contine
minimum

$$\frac{1}{g} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$$

- acum, vom discuta cum trebuie plasate punctele x_1 și x_2 în intervalul $[a, b]$
- la fiecare pas, am vrea să reducem lungimea intervalului cât de mult posibil, cu un efort cât mai mic posibil
- modul în care facem acest lucru este prezentat în Figura 6 pentru intervalul $[a, b] = [0, 1]$
- acceptăm două criterii pentru alegerea lui x_1 și x_2 : (a) le facem simetrice față de interval (deoarece nu avem informații despre care parte a intervalului conține minimul), și (b) le alegem astfel încât, indiferent care alegere este făcută pentru noul interval, atât x_1 cât și x_2 sunt folosite în pasul următor
- și anume, cerem ca (a) $x_1 = 1 - x_2$, și (b) $x_1 = x_2^2$
- după cum se arată în Figura 6, dacă noul interval este $[0, x_2]$, criteriul (b) ne asigură că punctul x_1 inițial va fi punctul „ x_2 ” pentru intervalul următor; prin urmare, doar o singură evaluare de funcție nouă, și anume $f(x_1 g)$, va fi necesară
- la fel, dacă noul interval este $[x_1, 1]$, atunci x_2 va deveni noul „ x_1 ”
- această abilitate de a refolosi evaluările de funcție înseamnă că, după primul pas, doar o singură evaluare a funcției obiectiv este necesară la fiecare pas
- criteriile (a) și (b) împreună implică faptul că $x_2^2 + x_2 - 1 = 0$
- soluția pozitivă a acestei ecuații de gradul doi este $x_2 = g = (\sqrt{5} - 1)/2$
- pentru a porni metoda, funcția obiectiv f trebuie să fie unimodală pe $[a, b]$, iar apoi f este evaluată în punctele interioare x_1 și x_2 , unde $a < x_1 = a + (1 - g)(b - a) < x_2 = a + g(b - a) < b$
- observăm că x_1 și x_2 se află exact la $1 - g$ și g din distanța dintre a și b
- noul interval este ales după cum am arătat, și acest pas de bază este repetat
- noul interval are lungimea g ori intervalul anterior, astfel că, după k pași, intervalul curent are lungimea $g^k(b - a)$
- mijlocul intervalului final este corect cu o precizie de jumătate din lungimea intervalului final, $g^k(b - a)/2$
- am demonstrat următoarea teoremă:

Teorema 1

După k pași ai căutării secțiunii de aur cu intervalul inițial $[a, b]$, mijlocul intervalului final este la cel mult $g^k(b - a)/2$ de minim, unde $g = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$.

Algoritmul 1 (Căutarea secțiunii de aur)

Fiind dată funcția f unimodală cu minimul în $[a, b]$

```

for  $i = 1, 2, 3, \dots$ 
   $g = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$ 
  if  $f(a + (1 - g)(b - a)) < f(a + g(b - a))$ 
     $b = a + g(b - a)$ 
  else
     $a = a + (1 - g)(b - a)$ 
  end
end
Intervalul final  $[a, b]$  conține minimul.
```

Exemplul 3

- folosiți căutarea secțiunii de aur pentru a găsi minimul lui $f(x) = x^6 - 11x^3 + 17x^2 - 7x + 1$ pe intervalul $[0, 1]$
- Figura 5 prezintă primii doi pași ai metodei
- la primul pas, $x_1 = 1 - g$ și $x_2 = g$, unde $g = (\sqrt{5} - 1)/2$

$$x_2 - g = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \Rightarrow x_1 = 1 - g$$

$$\sqrt{5} = 2,24$$

lungime interval corect
 $g^k (b-a)$

- deoarece $f(x_1) < f(x_2)$, intervalul $[0, 1]$ este înlocuit cu $[0, g]$
- noile x_1, x_2 sunt, respectiv, x_1g, x_2g anterioare
- în al doilea pas, din nou $f(x_1) < f(x_2)$, deci intervalul $[0, g]$ este înlocuit cu $[0, x_2]$
- primii 15 pași sunt prezentati în următorul tabel:

pasul	a	x_1	x_2	b
0	0.0000	0.3820	0.6180	1.0000
1	0.0000	0.2361	0.3820	0.6180
2	0.0000	0.1459	0.2361	0.3820
3	0.1459	0.2361	0.2918	0.3820
4	0.2361	0.2918	0.3262	0.3820
5	0.2361	0.2705	0.2918	0.3262
6	0.2705	0.2918	0.3050	0.3262
7	0.2705	0.2837	0.2918	0.3050
8	0.2705	0.2786	0.2837	0.2918

pasul	a	x_1	x_2	b
9	0.2786	0.2837	0.2868	0.2918
10	0.2786	0.2817	0.2837	0.2868
11	0.2817	0.2837	0.2849	0.2868
12	0.2817	0.2829	0.2837	0.2849
13	0.2829	0.2837	0.2841	0.2849
14	0.2829	0.2834	0.2837	0.2841
15	0.2834	0.2837	0.2838	0.2841

după 15 pași, putem spune că minimul este între 0.2834 și 0.2838

$$x_2 = \left(\frac{\sqrt{5}-1}{2} \right)^2 \Rightarrow g^2 = 0,3820$$

$$x_1 = (1-g)g = g - g^2 = 0,6180 - 0,3820 = 0,2361$$

la fiecare pas

noile x_1, x_2 se înmulțesc cu g

11.1.2. Interpolarea parabolica succesiva

- în căutarea secțiunii de aur, nu folosim evaluările de funcție $f(x_1)$ și $f(x_2)$, decât pentru a le compara
- o decizie este luată cum să continuăm, indiferent de cât de mare este una față de cealaltă
- în această subsecțiune, descriem o nouă metodă care risipește mai puțin valorile funcției; aceasta le folosește pentru a construi un model local al funcției
- modelul local ales este o parabolă, care este unic determinată de trei puncte
- începem cu trei puncte r, s, t din vecinătatea minimului, după cum se arată în Figura 7
- metoda diferențelor divizate ne dă

$$\begin{array}{c|ccc} r & f(r) & & \\ s & f(s) & d_1 & \\ t & f(t) & d_2 & d_3 \end{array}$$

$$\frac{f(s) - f(r)}{s - r} - d_1$$

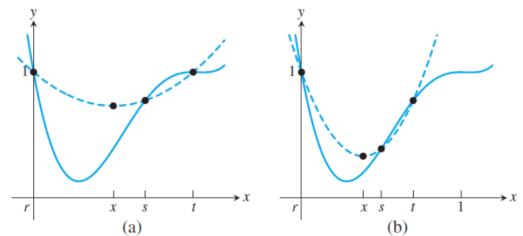


Figura 7: Interpolarea parabolică succesivă. (a) O parabolă este desenată prin cele trei puncte curente r, s, t , și minimul x al parabolei este folosit pentru a înlocui valoarea curentă a lui s . (b) Pasul este repetat cu noile puncte r, s, t .

- evaluăm funcția obiectiv f în cele trei puncte și desenăm parabola care trece prin ele

- unde $d_1 = (f(s) - f(r))/(s - r)$, $d_2 = (f(t) - f(s))/(t - s)$, și $d_3 = (d_2 - d_1)/(t - r)$
- prin urmare, putem exprima parabola sub forma

$$P(x) = f(r) + d_1(x - r) + d_3(x - r)(x - s). \quad (8)$$

- egalând derivata lui $P(x)$ cu 0 pentru a găsi minimul parabolei, obținem formula

$$x = \frac{r+s}{2} - \frac{(f(s) - f(r))(t-r)(t-s)}{2[(s-r)(f(t) - f(s)) - (f(s) - f(r))(t-s)]} \quad (9)$$

pentru noua aproximare a minimului

- în IPS, noul x poate să înlocuiască pe cel mai puțin recent sau pe cel mai puțin optim dintre r, s, t , și pasul este apoi repetat

- nu există o garanție a convergenței pentru IPS, spre deosebire de cazul căutării secțiunii de aur
- totuși, este de obicei mai rapidă atunci când converge, deoarece folosește informația obținută din evaluarea funcției într-un mod mai înțelept

Algoritmul 2 (Interpolarea parabolică succesivă)

Pornim cu minimele aproximative r, s, t

for $i = 1, 2, 3, \dots$

$$x = \frac{r+s}{2} - \frac{(f(s)-f(r))(t-r)(t-s)}{2[(s-r)(f(t)-f(s))-(f(s)-f(r))(t-s)]}$$

$$t = s$$

$$s = r$$

$$r = x$$

end

Exemplul 4

- folosîți interpolarea parabolică succesivă pentru a găsi minimul funcției $f(x) = x^6 - 11x^3 + 17x^2 - 7x + 1$ pe intervalul $[0, 1]$
- folosind punctele inițiale $r = 0, s = 0.7, t = 1$, calculăm următorii pași:

→ se aplică algoritm

pasul	x	$f(x)$
0	1.000000000000000	1.000000000000000
0	0.700000000000000	0.774649000000000
0	0.000000000000000	1.000000000000000
1	0.500000000000000	0.390625000000000
2	0.38589683548538	0.20147287814500
3	0.33175129602524	0.14844165724673
4	0.23735573316721	0.14933737764402
5	0.28526617269372	0.13172660338164
6	0.28516942161639	0.13172426136234
7	0.28374069464218	0.13170646451792
8	0.28364647631123	0.13170639859035

pasul	x	$f(x)$
9	0.28364826437569	0.13170639856301
10	0.28364835832962	0.13170639856295
11	0.28364835808377	0.13170639856295
12	0.28364833218729	0.13170639856295

concluzionăm că minimul este în apropierea lui $x_{\min} = 0.2836483$

observăm că după 12 pași am întrecut cu mult precizia căutării secțiunii de aur cu mai puține evaluări de funcție

nu am folosit niciun fel de informație despre derivata funcției obiectiv, deși am folosit cunoșterea valorilor exacte ale lui f , câtă vreme căutarea secțiunii de aur avea nevoie doar de comparații între valori observăm de asemenea din tabel o curiozitate în apropierea sfârșitului după cum am discutat în Capitolul 2, funcțiile sunt foarte plate în apropierea maximelor și minimelor relative

deoarece numere aflate la 10^{-7} de x_{\min} dau aceeași valoare minimă a funcției, nu putem să mergem mai departe de această precizie cât timp folosim dubla precizie IEEE, indiferent de câți pași ne permitem să facem

deoarece minimele apar, de obicei, în punctele în care funcția este zero, această dificultate nu este vina metodei de optimizare, ci este specifică virgulei flotante

progresia de la căutarea secțiunii de aur la IPS este similară aceleia de la metoda bisecției la metoda secantei

construirea unui model local pentru funcție și aproximarea funcției obiectiv cu acesta ajută la accelerarea convergenței

11.2. Optimizarea neconstranța cu derivate

- derivatele conțin informații despre ratele de creștere sau de scădere ale unei funcții, și în cazul derivatelor parțiale, de asemenea și direcțiile celei mai mari creșteri sau descreșteri
- dacă astfel de informații sunt disponibile despre funcția obiectiv, atunci ele pot fi exploataate pentru a găsi optimul mai eficient

11.2.1. Metoda lui Newton

- dacă funcția este derivabilă cu derivata continuă și derivata poate fi evaluată, atunci problema de optimizare poate fi exprimată ca o problemă de găsire a rădăcinilor
- începem într-o dimensiune, unde lucrurile sunt mai simple
- în minimul x^* al unei funcții derivabile cu derivata continuă $f(x)$, prima derivată trebuie să fie zero
- metodele din Capitolul 2 pot fi folosite pentru a rezolva ecuația rezultată $f'(x) = 0$
- dacă funcția obiectiv este unimodală și are un minim pe un interval, atunci pornirea metodei lui Newton cu o valoare inițială apropiată de minimul x^* va conduce la o convergență către x^*
- metoda lui Newton aplicată pentru $f'(x) = 0$ devine iterația

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}. \quad (10)$$

- deși metoda lui Newton (10) va găsi puncte în care $f'(x) = 0$, în general, nu este obligatoriu ca astfel de puncte să fie minime
- este important să avem o valoare inițială rezonabilă de apropiată de optim și să verificăm punctele pentru optimalitatea lor odată ce le-am localizat
- pentru optimizarea unei funcții $f(x_1, \dots, x_n)$ prin această metodă, folosim metoda lui Newton pentru mai multe variabile
- ca în cazul unu-dimensional, vrem să luăm derivata egală cu zero și să rezolvăm
- trebuie să avem

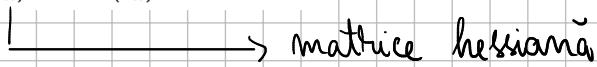
$$\nabla f = 0, \quad (11)$$

unde

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

denotă gradientul lui f

- metoda lui Newton pentru funcții cu valori vectoriale din Capitolul 3 ne permite să rezolvăm (11)
- Iuând $F(x) = \nabla f(x)$, pasul iterativ al metodei lui Newton va fi $x_{k+1} = x_k + v$, unde v este soluția lui $DF(x_k)v = -F(x_k)$

 matrice hessiană

- matricea jacobiană DF a gradientului este

$$H_f = DF = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix}, \quad (12)$$

care este matricea hessiană a lui f

- pasul Newton este, prin urmare,

$$\begin{cases} H_f(x_k)v = -\nabla f(x_k) \\ x_{k+1} = x_k + v. \end{cases} \quad (13)$$

Exemplul 5

- găsiți minimul funcției $f(x, y) = 5x^4 + 4x^2y - xy^3 + 4y^4 - x$, folosind metoda lui Newton
- funcția este prezentată în Figura 8

- $\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y}$
- gradientul este $\nabla f = [20x^3 + 8xy - y^3 - 1, 4x^2 - 3xy^2 + 16y^3]$, și hessiana este

$$H_f(x, y) = \begin{bmatrix} 60x^2 + 8y & 8x - 3y^2 \\ 8x - 3y^2 & -6xy + 48y^2 \end{bmatrix}.$$

- aplicând 10 pași ai metodei lui Newton (13), obținem următoarele rezultate:

pasul	x	y	f(x, y)
0	1.000000000000000	1.000000000000000	11.000000000000000
1	0.64429530201342	0.63758389261745	1.77001867827422
2	0.43064034542956	0.39233298702231	0.10112006537534
3	0.33877971433352	0.19857714160717	-0.17818585977225
4	0.50009733696780	-0.44771929519763	-0.42964065053918
5	0.49737350571430	-0.37972645728644	-0.45673719664708
6	0.49255000651877	-0.36497753746514	-0.45752009007757
7	0.49230831759106	-0.36428704569173	-0.45752162262701

pasul	x	y	f(x, y)
8	0.49230778672681	-0.36428555993321	-0.45752162263407
9	0.49230778672434	-0.36428555992634	-0.45752162263407
10	0.49230778672434	-0.36428555992634	-0.45752162263407

metoda lui Newton a fost convergentă cu o precizie egală cu cea din calculator la valoarea minimă aproximativă -0.4575

observăm o altă caracteristică a minimizării folosind metoda lui Newton: am obținut precizia din calculator pentru soluție, spre deosebire de cazul unu-dimensional al interpolării parabolice succesive

motivul este că nu mai lucrăm cu funcția obiectiv, ci am transformat problema doar într-o problemă de găsire a rădăcinilor care implică gradientul

deoarece ∇f are o rădăcină simplă în punctul optim, nu există nicio dificultate în a obține o eroare apropiată de valoarea epsilon mașină

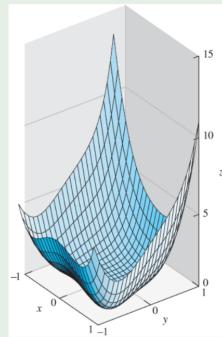


Figura 8: Graficul unei funcții bi-dimensionale. Graficul lui $z = 5x^4 + 4x^2y - xy^3 + 4y^4 - x$. Minimul este determinat ca fiind $\approx [0.4923, -0.3643]^T$.

$$\nabla f(x_0, y_0) \cdot v = -\nabla f(x_0, y_0)$$

$$v = \dots$$

$$\rightarrow x_{h+1} = x_h + v_0$$

$$y_{h+1} = y_h + v_1$$

$$\begin{bmatrix} 68 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26 \\ 17 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 68v_0 + 5v_1 \\ 5v_0 + 42v_1 \end{bmatrix} =$$

- metoda lui Newton este cea mai bună metodă dacă este posibil calculul hessianei
- în probleme bi-dimensionale, hessiană este de obicei disponibilă
- într-o dimensiune superioară n , ar putea fi fezabil doar să calculăm gradientul, un vector n -dimensional, în fiecare punct, dar nefezabil să construim hessiană de dimensiune $n \times n$
- următoarele două metode sunt de obicei mai lente decât metoda lui Newton, dar necesită doar calculul gradientului în diferite puncte

11.2.2. Metoda gradientului

- ideea fundamentală din spatele **metodei gradientului**, este de a găsi un minim al funcției mișcându-ne în direcția celei mai abrupte descreșteri față de punctul curent
- deoarece gradientul ∇f arată direcția celei mai abrupte creșteri a lui f , direcția opusă $-\nabla f$ arată cea mai abruptă descreștere
- cât de departe ar trebui să mergem în această direcție?
- acum că am redus problema la una de minimizare de-a lungul unei drepte, vom lăsa ca una dintre metodele unu-dimensionale să decidă cât de departe ar trebui să mergem
- după ce noul minim de-a lungul dreptei care indică cea mai abruptă descreștere este localizat, repetăm procesul, pornind de la acel punct
- și anume, găsim gradientul în noul punct, și facem o minimizare unu-dimensională de-a lungul noii direcții
- metoda gradientului este o buclă iterativă

Algoritm 3 (Metoda gradientului)

```

Fie  $x_0$  valoarea inițială
for  $i = 0, 1, 2, \dots$ 
     $v = \nabla f(x_i)$ 
    Minimizăm  $f(x - sv)$  pentru scalarul  $s = s^*$ 
     $x_{i+1} = x_i - s^* v$ 
end

```

- vom aplica metoda gradientului pentru funcția obiectiv din Exemplul 5

Exemplul 6

- găsiți minimul funcției $f(x, y) = 5x^4 + 4x^2y - xy^3 + 4y^4 - x$, folosind metoda gradientului
- urmăriți pașii anteriori, folosind interpolarea parabolică succesivă ca minimizor unu-dimensional
- rezultatele pentru 25 de pași sunt după cum urmează:

pasul	x	y	$f(x, y)$
0	1.000000000000000	-1.000000000000000	11.000000000000000
5	0.40314579518113	-0.27992088271756	-0.41964888830651
10	0.49196895085112	-0.36216404374206	-0.45750680523754
15	0.49228284433776	-0.36426635686172	-0.45752161934016
20	0.49230786417532	-0.36428539567277	-0.45752162263389
25	0.49230778262142	-0.36428556578033	-0.45752162263407

- convergența este mai lentă în comparație cu metoda lui Newton, dintr-un motiv justificat
- metoda lui Newton rezolvă o ecuație și folosește derive prime și secunde (inclusiv hessiană)
- metoda gradientului realizează minimizarea urmând direcția de descreștere și folosește doar informații despre prima derivată

8 - step size

$$\nabla f(x_i) = [20x^3 + 8xy - y^3 - 1, 4x^2 - 3xy^2 + 16y^3]$$

$$N_t = [12, -15]$$

$$[x_2, y_2] =$$

11.2.3. Căutarea gradientilor conjugati

- în Capitolul 3, metoda gradientilor conjugati a fost folosită pentru a rezolva ecuații cu matrici simetrice și pozitiv definite
- acum ne vom întoarce la această metodă, văzută dintr-o perspectivă diferită
- rezolvarea $Ax = w$ când A este simetrică și pozitiv definită este echivalentă cu găsirea minimului unui paraboloid
- în două dimensiuni, de exemplu, soluția sistemului liniar

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e \\ f \end{bmatrix} \quad (14)$$

este minimul paraboloidului

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}ax_1^2 + bx_1x_2 + \frac{1}{2}cx_2^2 - ex_1 - fx_2. \quad (15)$$

- explicația este că gradientul lui f este

$$\nabla f = [ax_1 + bx_2 - e, bx_1 + cx_2 - f].$$

- gradientul este zero în minim, ceea ce ne dă ecuația matricială anterioară
- pozitiv definită înseamnă că paraboloidul este convex
- observația cheie este că rezidualul $r = w - Ax$ sistemului liniar (14) este $-\nabla f(x)$, direcția celei mai abrupte descreșteri a funcției f în punctul x
- presupunem că am ales o direcție de căutare, notată prin vectorul d
- a minimiza f din (15) de-a lungul acestei direcții înseamnă a găsi acel α care minimizează funcția $h(\alpha) = f(x + \alpha d)$
- vom lua totuși derivata egală cu zero pentru a găsi minimul:

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla f \cdot d \\ &= (A(x + \alpha d) - [e, f]^T) \cdot d \\ &= (\alpha Ad - r)^T d. \end{aligned}$$

- aceasta implică faptul că

$$\alpha = \frac{r^T d}{d^T A d} = \frac{r^T r}{d^T A d},$$

me trb.

unde ultima egalitate rezultă din Teorema despre metoda gradientilor conjugati

- concluzionăm din acest calcul că am putea, alternativ, să găsim minimul unui paraboloid folosind metoda gradientilor conjugati, dar să înlocuim

$$r_i = -\nabla f$$

și

$$\alpha_i = \alpha \text{ care minimizează } f(x_{i-1} + \alpha d_{i-1}).$$

- de fapt, dacă privim lucrurile în acest fel, putem observa că am exprimat gradientul conjugat doar în funcție de f
- nu mai rămâne nicio mențiune a matricii A
- putem rula algoritmul în această formă pentru un f general
- în apropierea regiunilor unde f are o formă parabolică, metoda se va mișca spre minim foarte rapid
- noul algoritm are următorii pași:

Algoritmul 4 (Căutarea gradientilor conjugati)

Fie x_0 valoarea initială și luăm $d_0 = r_0 = -\nabla f = [20x^3 + 8xy^3 - 1, 4x^2 - 3xy^2 + 16y^3]$

for $i = 1, 2, 3, \dots$

$$\alpha_i = \alpha \text{ care minimizează } f(x_{i-1} + \alpha d_{i-1}) \leftarrow \frac{r_i^\top r_i}{d_i^\top A \cdot d_i}$$

$$x_i = x_{i-1} + \alpha_i d_{i-1}$$

$$r_i = -\nabla f(x_i)$$

$$\beta_i = \frac{r_i^\top r_i}{r_{i-1}^\top r_{i-1}}$$

$$d_i = r_i + \beta_i d_{i-1}$$

end

$$A \cdot x = M \cdot r$$

- vom încerca noua metodă pe un exemplu familiar

Exemplul 7

- găsiți minimul funcției $f(x, y) = 5x^4 + 4x^2y - xy^3 + 4y^4 - x$, folosind căutarea gradientilor conjugati
- urmăram pașii anteriori, folosind interpolarea parabolică succesivă ca minimizor unu-dimensional
- rezultatele pentru 20 de pași sunt după cum urmează:

pasul	x	y	$f(x, y)$
0	1.000000000000000	-1.000000000000000	11.000000000000000
5	0.46038657599935	-0.38316114029860	-0.44849953420621
10	0.49048892807181	-0.36106561127830	-0.45748477171484
15	0.49243714956128	-0.36421661473526	-0.45752147604312
20	0.49231477751583	-0.36429817275371	-0.45752162206984