Optimalizáló algoritmusok

Baran Ágnes

Előadás

A tananyag elkészítését az EFOP-3.4.3-16-2016-00021 számú projekt támogatta. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

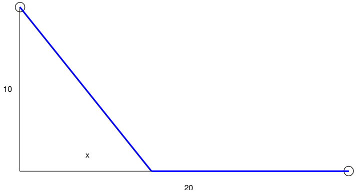
Tartalom I

Tartalom II

Példák optimalizációs feladatokra

Egy egyszerű példa

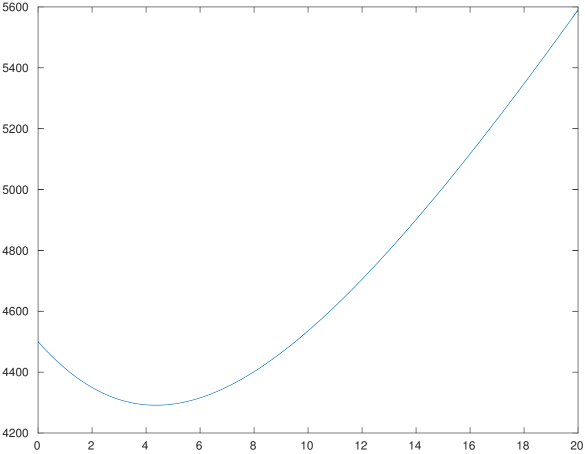
A parttól 10 km-re fekvő sziget áramellátását szeretnénk biztosítani egy olyan áramellátó központból, amely közvetlenül a parton helyezkedik el, 20 km-re a partnak a szigethez legközelebbi pontjától. Ha 250 ezer Ft-ba kerül 1 km víz alatti vezeték elhelyezése, és 100 ezerbe 1 km vezeték telepítése a szárazföldön, akkor határozzuk meg a minimális kölségű útvonalat.



A költségfüggvény (az árat ezer Ft-ban számolva):

$$f(x) = 250 \cdot \sqrt{10^2 + x^2} + 100 \cdot (20 - x)$$

Példák optimalizációs feladatokra



Az

$$f(x) = 250 \cdot \sqrt{10^2 + x^2} + 100 \cdot (20 - x)$$

függvény. $x_{opt} = 4.3644$, $f(x_{opt}) = 4291.3$

Példák optimalizációs feladatokra

Még egy egyszerű példa

Az 1000 cm^3 térfogatú téglatestek közül melyiknek a felszíne lesz minimális?

A célfüggvény (a téglatest éleinek hosszát x_1, x_2, x_3-mal jelölve):

$$f(x_1, x_2, x_3) = 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3$$

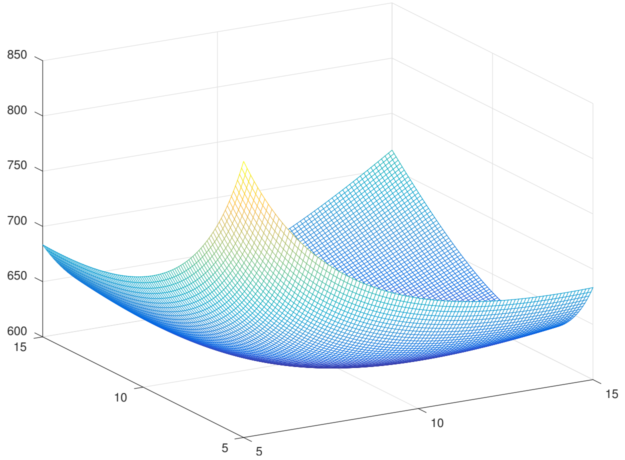
Korlátozó feltétel:

$$x_1x_2x_3 = 1000$$

A korlátozó feltétel eliminálható:

$$f(x_1, x_2) = 2x_1x_2 + \frac{2000}{x_2} + \frac{2000}{x_1}$$

Példák optimalizációs feladatokra



Az

$$f(x_1, x_2) = 2x_1x_2 + \frac{2000}{x_2} + \frac{2000}{x_1}$$

függvény. $x_{opt} = (10, 10)$, $f(x_{opt}) = 600$

Példák optimalizációs feladatokra

Egy elhelyezési probléma (Fermat-Weber)

Adott egy bolthálózat m üzletének elhelyezkedése. Helyezzük el az áruraktárat úgy, hogy az üzletektől vett távolságainak összege minimális legyen.

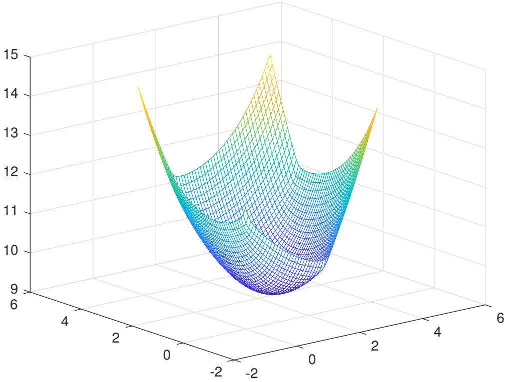
Jelölje $a_i \in \mathbb{R}^2$ az i-edik üzlet helykoordinátáit, $x \in \mathbb{R}^2$ a raktár helye.
A célfüggvény:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} \|a_i - x\|$$

A feladat másik változata: adottak a $w_1, \ldots, w_m$ súlyok, a minimalizálandó függvény:

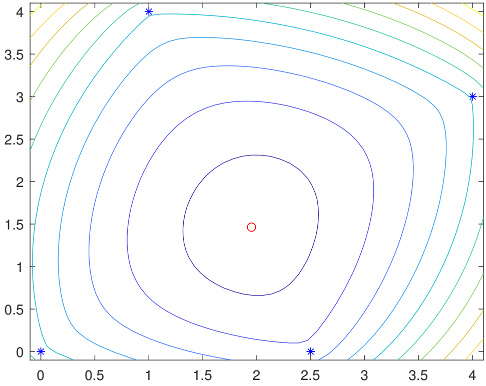
$$f(x) = \sum_{i=1}^{m} w_i \|a_i - x\|$$

Egy elhelyezési probléma



A $(2.5, 0)$, $(0, 0)$, $(4, 3)$, $(1, 4)$ pontokhoz és a $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 1$ súlyokhoz tartozó célfüggvény.

Egy elhelyezési probléma



A $(2.5, 0)$, $(0, 0)$, $(4, 3)$, $(1, 4)$ pontokhoz és a $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 1$ súlyokhoz tartozó megoldás a célfüggvény szintvonalaival.

Példák optimalizációs feladatokra

Egy elhelyezési feladat (1-kör probléma)

Egy téli üdülőövezetben a mentőhelikopter bázisállomását úgy szeretnénk elhelyezni, hogy az n adott síkközponttól mért legnagyobb távolsága minimális legyen.

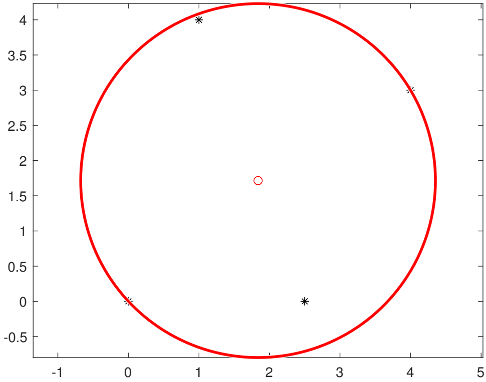
Meg kell találnunk azt a c középpontú r sugarú kört, mely lefedi az adott n pontot, és a sugara minimális.

Ha az i-edik síközpont koordinátája $a_i \in \mathbb{R}^2$, akkor a célfüggvény:

$$F(c) = \max_i \|a_i - c\|$$

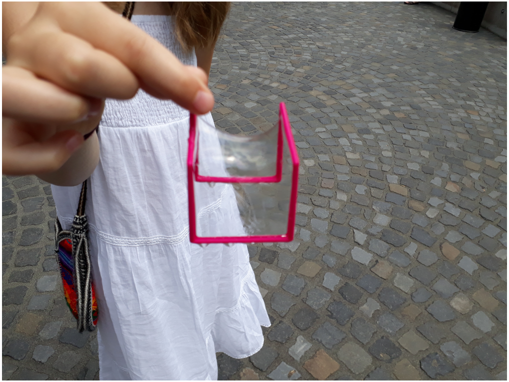
A keresett kör középpontja a minimumhely, sugara a minimumérték.

Egy elhelyezési probléma



A $(2.5, 0)$, $(0, 0)$, $(4, 3)$, $(1, 4)$ pontokhoz tartozó kör.

Példák optimalizációs feladatokra



Példák optimalizációs feladatokra

Minimális felület

Adott egy $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ tartomány, Γ peremmel. Legyen $r : \Gamma \to \mathbb{R}$ adott függvény. Olyan $q : \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$ függvényt keresünk, mely a peremen egybeesik r-rel, és amelynek a gráfja minimális felszínű.

Tekintsük $\overline{\Omega}$ egy reguláris triangularizációját:

$$\overline{\Omega} \approx \bigcup_{k=1}^{m} T_k$$

A triangularizáció belső csúcspontjai legyenek

$$x^1, \ldots, x^n \in \Omega,$$

a perempontjai

$$x^{n+1}, \ldots, x^{n+\ell} \in \Gamma$$

A q függvényt egy olyan folytonos $q_T : \bigcup_{k=1}^{m} T_k \to \mathbb{R}$ függvénnyel közelítjük, mely minden T_k háromszög felett lineáris.

Legyen $z_i = q_T(x^i)$, $i = 1, \ldots, n + \ell$.

Ha a T_k háromszög csúcsai x^{a_k}, x^{b_k}, x^{c_k}, akkor a T_k fölötti gráf felszíne:

$$A_k(z) = \frac{1}{2} \left\| \begin{pmatrix} x^{b_k} - x^{a_k} \\ z_{b_k} - z_{a_k} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x^{c_k} - x^{a_k} \\ z_{c_k} - z_{a_k} \end{pmatrix} \right\|$$

A feladat:

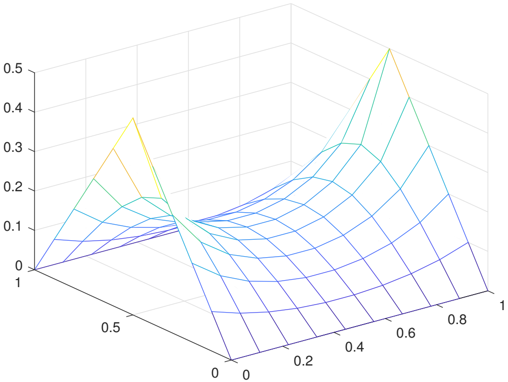
$$\min_{y \in \mathbb{R}^{n+\ell}} \sum_{k=1}^{m} A_k(z)$$

a

$$z_i = r(x_i), \quad i = n + 1, \ldots, n + \ell$$

feltételek mellett.

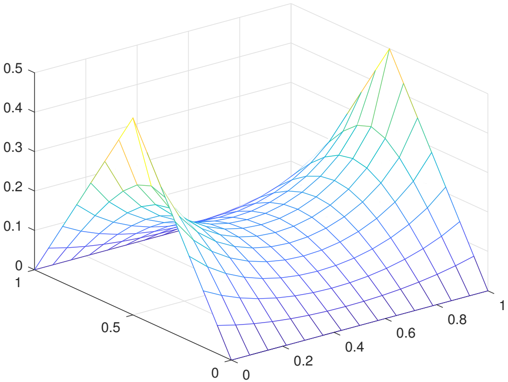
Minimális felület



$\Omega = (0,1)^2$ és $r(x,y) = \frac{1}{2} - \left|y - \frac{1}{2}\right|$

10×11 rácspont

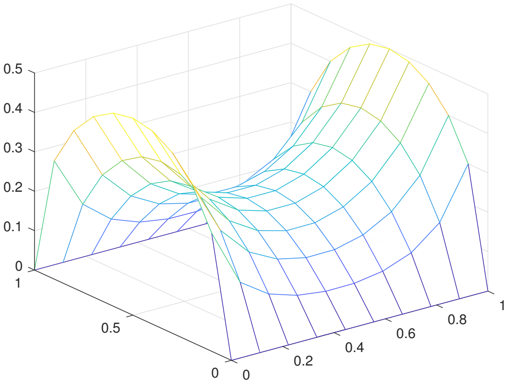
Minimális felület



$\Omega = (0,1)^2$ és $r(x,y) = \frac{1}{2} - \left|y - \frac{1}{2}\right|$

15×15 rácspont

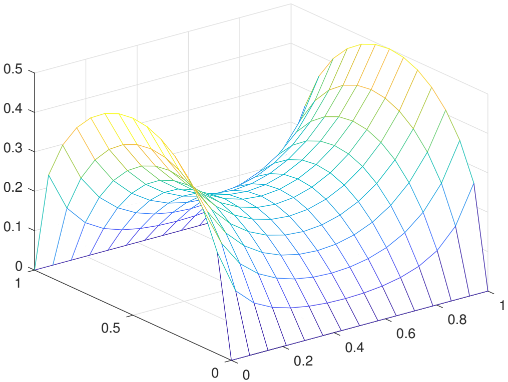
Minimális felület



$\Omega = (0,1)^2$ és $r(x,y) = \sqrt{\frac{1}{4} - \left(y - \frac{1}{2}\right)^2}$

10×11 rácspont

Minimális felület



$\Omega = (0,1)^2$ és $r(x,y) = \sqrt{\frac{1}{4} - \left(y - \frac{1}{2}\right)^2}$

15×15 rácspont

Példák optimalizációs feladatokra

Modell illesztése (regresszió)

Adottak a (t_i, f_i), $i = 1, \ldots, m$, megfigyelések, ezekre szeretnénk adott $F(t, x)$ alakú modellt illeszteni, ahol $x = (x_1, \ldots, x_n)$ ismeretlen paraméterek és $m > n$.

A

$$J(x) = \sum_{i=1}^{m} (F(t_i, x) - f_i)^2$$

függvényt minimalizáljuk, ahol $J : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

Ha F a paraméterek lineáris függvénye, akkor lineáris legkisebb négyzetes feladat, ellenkező esetben nemlineáris legkisebb négyzetes feladat.

Példák optimalizációs feladatokra

Helymeghatározás GPS-sel

Az ismert (x_i, y_i, z_i) koordinátájú S_i műholdak által kibocsátott adott terjedési sebességű hullámok mérésének segítségével kell a vevőkészülék (x, y, z) koordinátáját meghatározni.

Az S_i műhold a fedélzeti atomórája segítségével digitális kódot állít elő, ezzel modulálja a kibocsátott hullámot. A vevő a saját órája szerint előállítja a kódot, és a kettőt összehasonlítva meghatározza az eltelt Δt_i időt, majd ebből az $R_i = \Delta t_i \cdot c$ távolságot.

Ebből a vevő (x, y, z) koordinátáira

$$(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 = (\Delta t_i \cdot c)^2$$

3 ismeretlen $\rightarrow$ 3 műhold

Helymeghatározás GPS-sel

Mivel a vevő órája általában nincs szinkronban a műholdak óráival, ezért a Δt_i értéke pontatlan (1 μs időeltérés kb 300 m eltérés a távolságban...)

Tfh a t_0 időkülönbség van az atomórák és a vevő által mutatott idők között. Ekkor az előző egyenlet helyett:

$$(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2 = ((\Delta t_i + t_0) \cdot c)^2$$

4 ismeretlen $(x, y, z, t_0) \to$ 4 műhold szükséges

Nemlineáris legkisebb négyzetes feladat, további mérések (műholdak) tovább csökkenthetik a hibát.

Példák optimalizációs feladatokra

Hatóanyag koncentráció

Egy szájon át bevett gyógyszer esetén a szervezetben t idő után az $x(t)$ hatóanyag koncentrációt az ú.n. Bateman-függvény írja le

$$x(t) = \begin{cases} C_0 \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}(e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) & \text{ha } \lambda_1 \neq \lambda_2, \\ C_0 \lambda_1 e^{-\lambda_1 t} & \text{ha } \lambda_1 = \lambda_2 \end{cases}$$

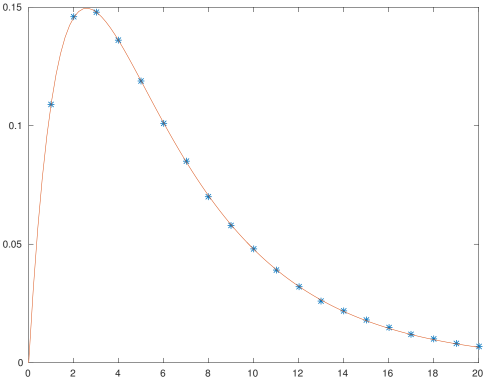
ahol λ_1, λ_2 és C_0 paraméterek. Pácienseknél adott időpontokban megmérték a hatóanyag koncentrációját a vérben, ezek alapján becsüljük meg a paramétereket.

Ha adottak a (t_i, x_i), $i = 1, \ldots, m$ mérések, akkor a célfüggvény:

$$f(C_0, \lambda_1, \lambda_2) = \sum_{i=1}^{m} |x(t_i) - x_i|^2$$

(Nemlineáris regresszió)

Hatóanyag koncentráció



Az illesztett Bateman-függvény egy konkrét adatsor esetén.

Példák optimalizációs feladatokra

Image deblurring

Adott egy zajos kép és valami információ a zajról: pl. a fotóalany vagy a fotós elmozdulásából származik a zaj. Próbáljuk meg helyreállítani a képet.

Image deblurring (motion blur)

Adott a torzítást leíró D mátrix, és a torzított képet tartalmazó b vektor. Keressük azt az x vektort (az eredeti kép), melyre $b = Dx$. Ezt legkisebb négyzetek módszerével megoldva még mindig zajos lehet az eredmény, így egy $\lambda \|Lx\|^2$ regularizációs tagot is hozzáveszünk a célfüggvényhez:

$$f(x) = \|Dx - b\|^2 + \lambda \|Lx\|^2$$

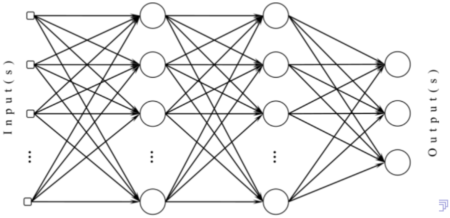
Példák optimalizációs feladatokra

Neurális hálózatok

Adottak az $x^1, \ldots, x^M$ input vektorok (képek, szövegek, stb.) és a megfelelő $d_1, \ldots, d_M$ cimkék. Úgy szeretnénk meghatározni a neurális hálózat (MLP, CNN, stb) súlyait, hogy a veszteségfüggvény minimális értéket vegyen fel, pl.

$$F(w) = \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{M} (d_i - y_i)^2,$$

ahol y_i a hálózat által x^i-re adott kimenet.



Példák optimalizációs feladatokra

Portfólió optimalizálás

Egy megadott összegből szeretnénk n féle részvény közül vásárolni úgy, hogy a várható hozam egy megadott ϱ korlát fölött legyen, ugyanakkor a kockázat minimális legyen.

Tfh az i-edik részvény hozama egy m_i várható értékű valószínűségi változó, és legyen C a hozamok kovarianciamátrixa.

Az $x = (x_1, \ldots, x_n)$ portfólió kockázata az

$$\frac{1}{2} x^T C x$$

függvénnyel mérhető, a korlátozó feltételek:

$$\sum_{i=1}^{n} m_i x_i \geq \varrho, \quad \sum_{i=1}^{n} x_i = 1, \quad x \geq 0$$

Jelölések, definíciók

Az $x \in \mathbb{R}^n$ vektor alatt az

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad x_i \in \mathbb{R}$$

oszlopvektort értjük.

Euklideszi vektornorma

$$\|x\| = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right)^{1/2}, \qquad x \in \mathbb{R}^n$$

Megjegyzés

$$\|x\| = \sqrt{x^T x}$$

Definíció (Pozitív szemidefinit, pozitív definit mátrix)

Az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix pozitív szemidefinit, ha

$$x^T A x \geq 0 \quad \text{minden} \quad x \in \mathbb{R}^n \quad \text{esetén},$$

pozitív definit, ha

$$x^T A x > 0 \quad \text{minden} \quad x \in \mathbb{R}^n \quad x \neq 0, \quad \text{esetén}.$$

Állítás

Ha $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus, akkor a következő állítások ekvivalensek:

- A pozitív definit
- Az A összes bal felső főminora pozitív
- Létezik az $A = LL^T$ Cholesky-felbontás, reguláris L mátrixszal
- Az A összes sajátértéke pozitív

Definíció (Negatív szemidefinit, negatív defintit, indefinit mátrix)

Az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix negatív szemidefinit, ha

$$x^T Ax \leq 0 \quad \text{minden} \quad x \in \mathbb{R}^n \quad \text{esetén},$$

negatív definit, ha

$$x^T Ax < 0 \quad \text{minden} \quad x \in \mathbb{R}^n \quad x \neq 0, \quad \text{esetén}.$$

Az A mátrix indefinit, ha nem pozitív definit, pozitív szemidefinit, negatív definit, negatív szemidefinit.

Tétel

A szimmerikus $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix pontosan akkor

- pozitív definit, ha minden bal felső főminora pozitív
- negatív definit, ha a bal felső főminorai váltakozva negatívak és pozitívak (az első negatív).

Állítás

Egy szimmerikus $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ mátrix pontosan akkor

- pozitív definit, ha $a_{11} > 0$ és $\det(A) > 0$,
- negatív definit, ha $a_{11} < 0$ és $\det(A) > 0$,
- indefinit, ha $\det(A) < 0$.

Optimalizációs feladatok

Adott egy $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvény, keresett

$$\min_x f(x),$$

amikor

$$c_i(x) = 0, \quad i \in E$$

és

$$c_i(x) \geq 0, \quad i \in I$$

- f: célfüggvény
- c_i: feltétel függvények
- $\{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) = 0 \text{ ha } i \in E, \quad c_i(x) \geq 0 \text{ ha } i \in I\}$: megengedett tartomány

Optimalizációs feladatok osztályozása

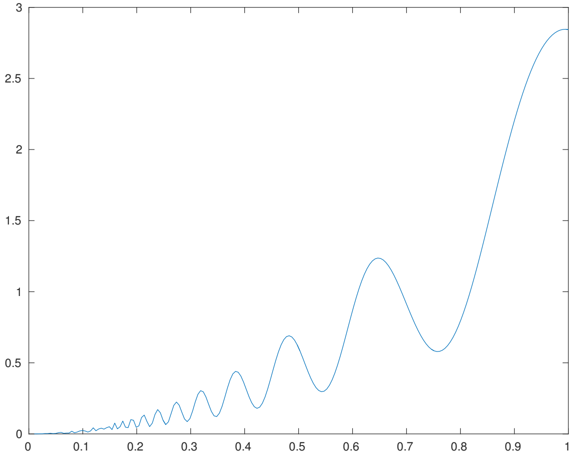
- diszkrét vs folytonos
- feltétel nélküli vs feltételes
- lokális vs globális
- determinisztikus vs sztochasztikus

Feltétel nélküli optimalizálás

Adott $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ folyt. diff.ható fv, keresett

$$\min_x f(x)$$

- x^* **globális minimumhely**, ha $f(x^*) \leq f(x)$, minden $x \in \mathbb{R}^n$ esetén
- x^* **lokális minimumhely**, ha x^*-nak van olyan $\mathcal{N}$ környezete, hogy $f(x^*) \leq f(x)$, minden $x \in \mathcal{N}$ esetén
- x^* **szigorú lokális minimumhely**, ha x^*-nak van olyan $\mathcal{N}$ környezete, hogy $f(x^*) < f(x)$, minden $x \in \mathcal{N}$ esetén
- x^* **izolált lokális minimumhely**, ha x^*-nak van olyan $\mathcal{N}$ környezete, amiben nincs más lokális minimumhely



Az $f(x) = x^2 \cos\left(\frac{12}{x}\right) + 2x^2$ függvény a $[0.01, 1]$ intervallumon.

Jelölések

Gradiens

Ha $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ differenciálható, akkor az f függvény x-beli gradiense

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

Hesse-mátrix

Ha $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ kétszer differenciálható, akkor az f függvény x-beli Hesse-mátrixa

$$\nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{i,j} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

Jelölések

Jacobi-mátrix

Ha $F:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ differenciálható, akkor az F Jacobi-mátrixa

$$F'(x) = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}\right)_{i,j} \in \mathbb{R}^{m\times n}$$

azaz

$$F'(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial F_1}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x) \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial F_2}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial F_m}{\partial x_1}(x) & \frac{\partial F_m}{\partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial F_m}{\partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

Megj.: A Jacobi-mátrix i-edik sora $\nabla F_i(x)^T$

Feladatok

Számítsa ki az alábbi függvények gradiensét és Hesse-mátrixát!

(a) $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - 3x_2^3 + \cos(x_1 x_2)$

(b) $f(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2 x_3 - x_3 e^{x_1} + x_2^4 x_3^2$

Feladatok

Határozza meg az alábbi függvények Jacobi-mátrixát!

(a)

$$f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_1^2 x_2 - 2x_2^3 \\ \sin(x_1 x_2) - 1 \\ 3 - x_1 - x_2 \end{pmatrix}$$

(b)

$$f(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} e^{x_1 x_3} + x_2^3 \\ \cos(x_1 - 2x_2 + x_3) \end{pmatrix}$$

Taylor-tétel

Tétel

Ha $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható, és $p \in \mathbb{R}^n$, akkor

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p$$

valamely $t \in (0,1)$ esetén. Ha f kétszer folyt. differenciálható, akkor

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

valamely $t \in (0,1)$-re.

Kvadratikus függvény

Definíció

Az $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvényt kvadratikus függvénynek nevezzük, ha

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$$

alakba írható, ahol $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus mátrix, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$.

Példa.
$f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, ahol

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \end{pmatrix}^T x + 5,$$

azaz

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}(2x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_1x_2) - x_1 + 4x_2 + 5 \\ &= x_1^2 + \frac{3}{2}x_2^2 + x_1x_2 - x_1 + 4x_2 + 5 \end{aligned}$$

Kvadratikus függvény

Példa

Írjuk fel mátrixos alakban az alábbi kvadratikus függvényt!

$$f(x_1, x_2) = 4x_1^2 + 6x_1x_2 + 6x_2^2 + 7x_1 - 3x_2 - 1$$

Megoldás.

$$f(x) = \frac{1}{2}\underbrace{(2x_1^2 + 3x_1x_2 + 3x_2^2)}_{x^TAx} + \underbrace{(7x_1 - 3x_2)}_{b^Tx} \underbrace{-1}_{c}$$

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T \begin{pmatrix} 2 & \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} & 3 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} 7 \\ -3 \end{pmatrix}^T x - 1$$

Kvadratikus függvény gradiense, Hesse-mátrixa

Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ úgy definiálva, hogy

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c,$$

ahol $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$.

Ekkor

$$\nabla f(x) = Ax + b \quad \text{és} \quad \nabla^2 f(x) = A$$

A lokális szélsőérték feltételei

Tétel (A szélsőérték elsőrendű szükséges feltétele)

Ha x^* az $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ lokális minimumhelye, és f folytonosan differenciálható az x^* egy nyílt környezetében, akkor $\nabla f(x^*) = 0$.

Definíció (Stacionárius pont)

Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Az x^* pontot stacionárius pontnak hívjuk, ha $\nabla f(x^*) = 0$.

Megjegyzés

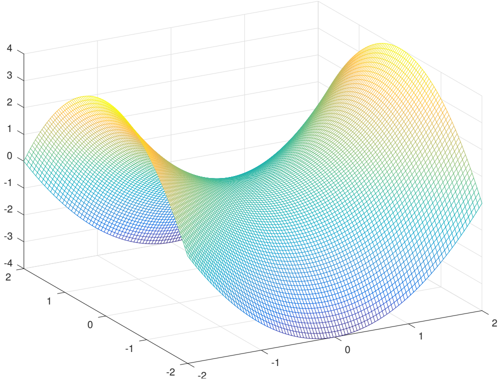
Ha x^* stacionárius pontja f-nek, akkor stacionárius pontja $-f$-nek is, azaz a stacionárius pont lokális maximum is lehet.

Definíció (Nyeregpont)

Ha x^* olyan stacionárius pontja f-nek, amely se nem lokális minimum, se nem lokális maximum, akkor nyeregpontnak hívjuk.

Példa

Legyen $f(x) = x_1^2 - x_2^2$. Ekkor $\nabla f(x) = (2x_1, -2x_2)^T$, így $x = (0,0)$ az egyetlen stacionárius pont, amely nyeregpont.

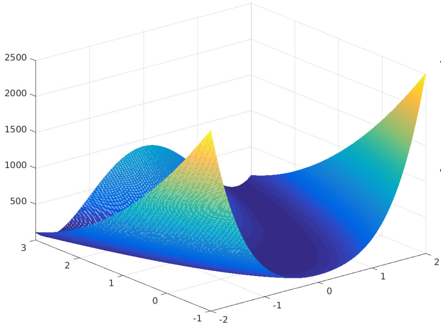


Feladat (Rosenbrock-függvény)

Határozza meg az

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

függvény stacionárius pontjait!



$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -400(x_2 - x_1^2)x_1 + 2(x_1 - 1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix}$$

Az egyetlen stacionárius pont:

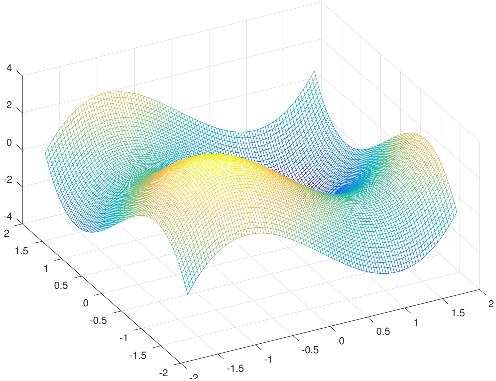
$$x = (1, 1)$$

Feladat

Határozza meg az

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$$

függvény stacionárius pontjait!



$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 - 3 \\ 3x_2^2 - 3 \end{pmatrix}$$

Négy stacionárius pont:

$$(1,1), \quad (1,-1),$$
$$(-1,1), \quad (-1,-1)$$

A lokális szélsőérték feltételei

Tétel (A szélsőérték másodrendű szükséges feltételei)

Ha x^* az f egy lokális minimumhelye, továbbá $\nabla^2 f$ létezik és folytonos az x^* egy nyílt környezetében, akkor

- $\nabla f(x^*) = 0$,
- $\nabla^2 f(x^*)$ pozitív szemidefinit.

Tétel (A szélsőérték másodrendű elegendő feltételei)

Tegyük fel, hogy $\nabla^2 f$ létezik és folytonos az x^* egy nyílt környezetében, továbbá

- $\nabla f(x^*) = 0$,
- $\nabla^2 f(x^*)$ pozitív definit.

Ekkor x^* szigorú lokális minimumhelye f-nek.

A stacionárius pont típusai

Tétel

Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ kétszer folytonosan differenciálható és $\nabla f(x^*) = 0$.

- Ha $\nabla^2 f(x^*)$ pozitív definit, akkor f-nek x^*-ban szigorú lokális minimuma van.
- Ha $\nabla^2 f(x^*)$ negatív definit, akkor f-nek x^*-ban szigorú lokális maximuma van.
- Ha $\nabla^2 f(x^*)$ indefinit, akkor f-nek x^*-ban nyeregpontja van.

Feladat (Rosenbrock-függvény)

Vizsgálja meg a Hesse-mátrix definitségét az

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

függvény stacionárius pontjában.

A gradiens vektor:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -400(x_2 - x_1^2)x_1 + 2(x_1 - 1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix}$$

Az egyetlen stacionárius pont: (1,1).
A Hesse-mátrix:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}$$

A Hesse-mátrix:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}$$

A Hesse-mátrix értéke az (1,1) pontban:

$$\nabla^2 f(1,1) = \begin{pmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}$$

Ez a mátrix pozitív definit, mert

$$\Delta_1 = 802 > 0$$
$$\Delta_2 = 802 \cdot 200 - 400^2 > 0,$$

így az (1,1) pontban a függvénynek minimuma van.

Feladat

Vizsgálja meg a Hesse-mátrix definitségét az

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$$

függvény stacionárius pontjaiban!

A gradiens és a Hesse-mátrix:

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 - 3 \\ 3x_2^2 - 3 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 6x_1 & 0 \\ 0 & 6x_2 \end{pmatrix}$$

A Hesse-mátrix a stacionárius pontokban:

$$\nabla^2 f(1,1) = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 6 \end{pmatrix},$$

ami pozitív definit ($\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 > 0$), így az $(1,1)$ pont lokális minimumhely.

A Hesse-mátrix a stacionárius pontokban:

$$\nabla^2 f(-1,-1) = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & -6 \end{pmatrix},$$

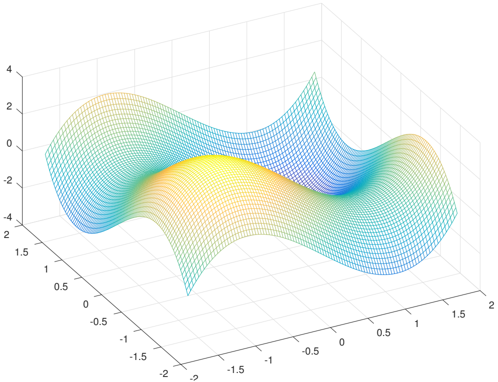
ami negatív definit ($\Delta_1 < 0$, $\Delta_2 > 0$), így a $(-1,-1)$ pont lokális maximumhely.

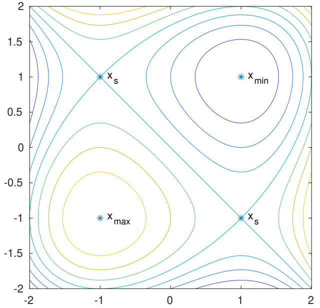
$$\nabla^2 f(-1,1) = \begin{pmatrix} -6 & 0 \\ 0 & 6 \end{pmatrix},$$

ami indefinit ($\Delta_1 < 0$, $\Delta_2 < 0$), így a $(-1,1)$ pont nyeregpont.

$$\nabla^2 f(1,-1) = \begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & -6 \end{pmatrix},$$

ami indefinit ($\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 < 0$), így az $(1,-1)$ pont nyeregpont.





Az $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$ függvény, a szintvonalai és a stacionárius pontjai

Feladat

Számítsa ki az alábbi függvény stacionárius pontjait, és vizsgálja meg melyik milyen típusú!

(a) $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^4 - 36x_1x_2$

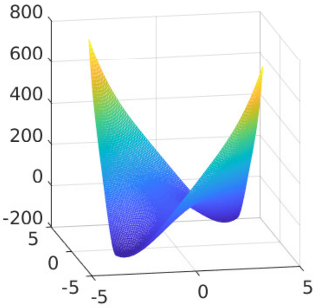
(b) $f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2)^2 - 2(x_1^2 - x_2^2) + 1$

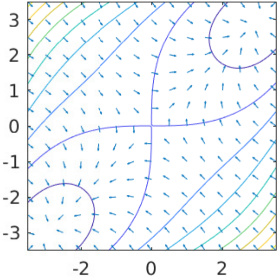
(c) $f(x_1, x_2) = \frac{1}{6}x_1^3 - x_1 + \frac{1}{4}x_1x_2^2$

(d) $f(x_1, x_2) = \sin(x_1)\cos(x_2)$, ha $x \in [0, 2\pi) \times x \in [0, 2\pi)$

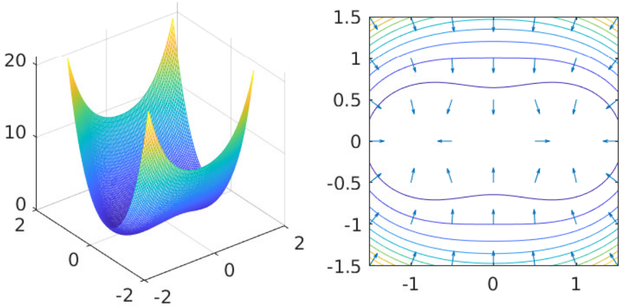
(e) $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{1}{x_1^2x_2^2}$, ha $x_1, x_2 \neq 0$

(f) $f(x_1, x_2) = x_2(1 - x_1^2 - x_2^2)$

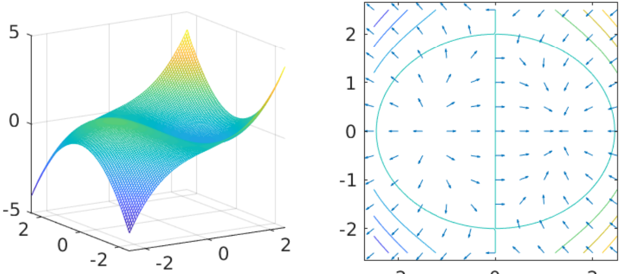




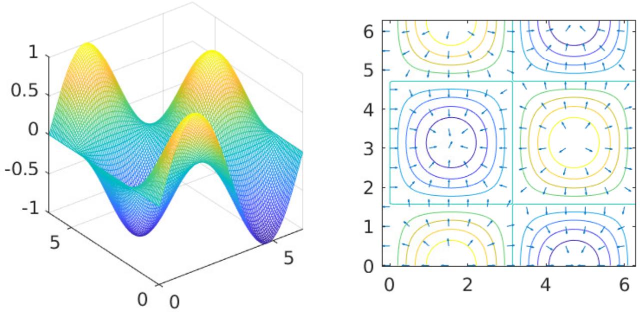
Az $f(x_1, x_2) = x_1^4 + x_2^4 - 36x_1x_2$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.



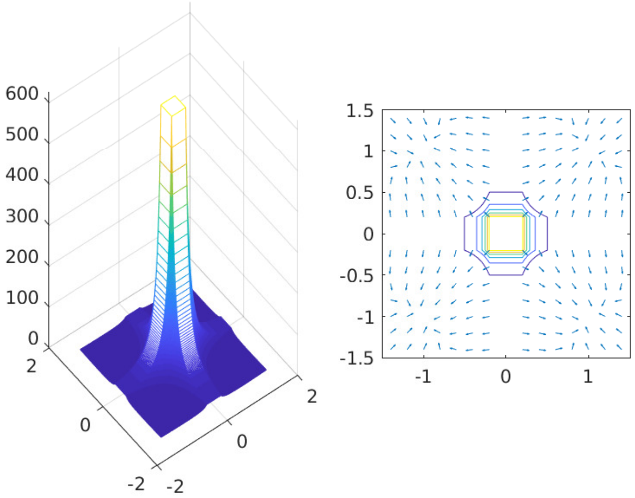
Az $f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2^2)^2 - 2(x_1^2 - x_2^2) + 1$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.



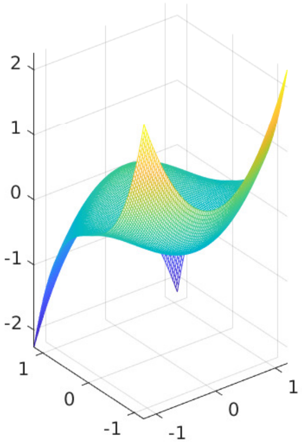
Az $f(x_1, x_2) = \frac{1}{6}x_1^3 - x_1 + \frac{1}{4}x_1 x_2^2$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.

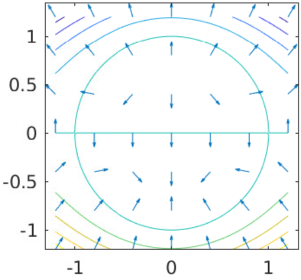


Az $f(x_1, x_2) = \sin(x_1)\cos(x_2)$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.



A $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + \frac{1}{x_1^2 x_2^2}$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.





A $f(x_1, x_2) = x_2(1 - x_1^2 - x_2^2)$ függvény, a szintvonalai és a normált negatív gradiens mező.

Konvexitás

Definíció (Konvex halmaz)

Az $S \subset \mathbb{R}^n$ halmaz konvex, ha bármely $x \in S$, $y \in S$ és $t \in [0,1]$ esetén $tx + (1-t)y \in S$.

Definíció (Konvex, konkáv függvény)

Az $f : S \to \mathbb{R}$ függvény konvex, ha S konvex és

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y), \quad \forall x, y \in S, \quad \forall t \in [0,1]$$

Az f konkáv, ha $-f$ konvex.
Az f szigorúan konvex, ha

$$f(tx + (1-t)y) < tf(x) + (1-t)f(y), \quad \forall x, y \in S, x \neq y \quad \forall t \in (0,1)$$

Konvex függvények

Példák konvex függvényre

- Az $f(x) = c^T x + b$ függvény, ahol $x \in \mathbb{R}^n$, és $c \in \mathbb{R}^n$ és $b \in \mathbb{R}$ tetszőleges konstansok.
- Az $f(x) = x^T A x$ függvény, ahol $x \in \mathbb{R}^n$, és $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitív szemidefinit mátrix

Tétel

Ha f konvex, akkor minden lokális minimumhely globális minimumhely. Ha f még differenciálható is, akkor minden stacionárius pont globális minimumhely.

Tétel

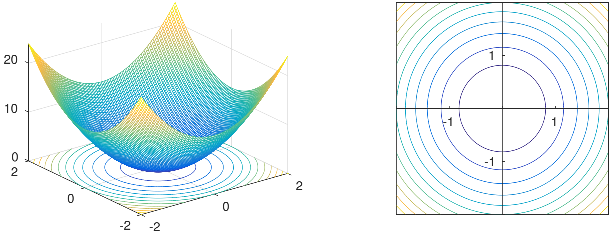
Ha f egy konvex, nyílt halmazon értelmezett függvény, mely kétszer folytonosan differenciálható, akkor f pontosan akkor konvex, ha $\nabla^2 f(x)$ pozitív szemidefinit minden x esetén.

Konvex kvadratikus függvények, példák

$f(x) = x^T A x$, ahol

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}, \quad a > 0.$$

Ekkor a függvénynek globális minimuma van $(0,0)$-ban, a szintvonalai origó középpontú körök.



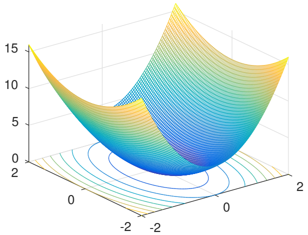
$$f(x) = 3x_1^2 + 3x_2^2 \quad (a = 3)$$

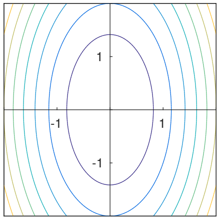
Konvex kvadratikus függvények, példák

$f(x) = x^T Ax$, ahol

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}, \quad a, b > 0, \quad a \neq b.$$

Globális minimum $(0, 0)$-ban, a szintvonalak origó középpontú ellipszisek, tengelyeik párhuzamosak a koordinátatengelyekkel. Ha $a > b$, akkor az x_2-tengely, ha $a < b$, akkor az x_1-tengely irányában nyújtottak a szintvonalak.





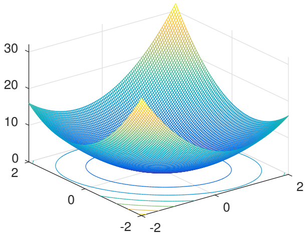
$f(x) = 3x_1^2 + x_2^2 \quad (a = 3, b = 1)$

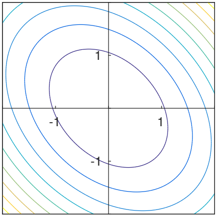
Konvex kvadratikus függvények, példák

$f(x) = x^T A x$, ahol

$$A = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}, \quad a > 0, \quad b, c \neq 0, \quad ab - c^2 > 0.$$

Globális minimum $(0,0)$-ban, a szintvonalak origó középpontú ellipszisek, tengelyeik **nem** párhuzamosak a koordinátatengelyekkel.





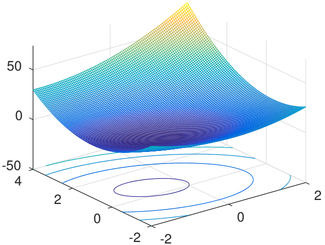
$$f(x) = 3x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_1x_2 \quad (a = 3, b = 3, c = 1)$$

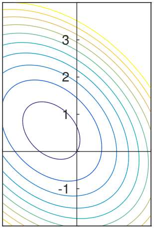
Konvex kvadratikus függvények, példák

$f(x) = x^T Ax + d^T x$, ahol

$$A = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad a > 0, \quad b, c, d_1, d_2 \neq 0, \quad ab - c^2 > 0.$$

A szintvonalak **nem** origó középpontú ellipszisek, tengelyeik **nem** párhuzamosak a koordinátatengelyekkel.





$$f(x) = 3x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_1x_2 + 3x_1 - x_2 \quad (a = 3, b = 3, c = 1, d_1 = 3, d_2 = -1)$$

Optimalizáló eljárások

(1) Egy x_0 kezdeti közelítés megadása
(2) Az $x_k \to x_{k+1}$ stratégia meghatározása
(3) Leállási feltétel

Két alapvető stratégia:

- Vonalmenti keresés
  Meghatározunk egy p_k irányt, amerre csökken a függvény, és ebben az irányban egy egyváltozós minimalizálást hajtunk végre.
  $$\min_{\alpha} f(x_k + \alpha p_k)$$
- Megbízhatósági tartomány alapú
  f-et az x_k környezetében lokálisan egy m_k modellfüggvénnyel közelítjük, és f helyett m_k-t minimalizáljuk, a megbízhatósági tartományon belül.
  $$\min_{p} m_k(x_k + p), \qquad \text{ahol } x_k + p \text{ a tartományban van}$$

Vonalmenti keresések, a keresési irány

A p keresési irány megválasztása: csökkenjen a függvény.
A Taylor-tételből: kicsi α esetén

$$f(x_k + \alpha p) \approx f(x_k) + \alpha p^T \nabla f_k.$$

Csökkenési irány

A $p \in \mathbb{R}^n$ irány x-beli csökkenési irány (leereszkedési irány), ha $p^T \nabla f(x) < 0$.

Mivel

$$p^T \nabla f_k = \|p\| \cdot \|\nabla f_k\| \cos \Theta,$$

ha $\cos \Theta < 0$, akkor $p^T \nabla f_k < 0$

Legmeredekebb leereszkedés (Gradiens módszer)

Ha $p = -\nabla f_k$ (azaz $\cos \Theta = -1$).

Vonalmenti keresések - lépéshossz választás

Ha adott a p_k keresési irány, akkor az

$$\alpha \mapsto f(x_k + \alpha p_k), \quad (\alpha > 0)$$

egyváltozós függvényt kellene minimalizálni.

A minimumhely meghatározása túl költséges lehet, ezért sokszor beérjük egy ,,elég jó'' α értékkel.

Két lépés:

- Meghatározunk egy intervallumot, ahol α-t keressük (max. lépéshossz)
- Az adott intervallumon keresünk egy elegendően jó α-t (amire $f(x_k + \alpha p_k)$ elegendő mértékben kisebb $f(x_k)$-nál)

Vonalmenti keresések - lépéshossz választás

Úgy választjuk a lépéshosszt, hogy **a függvény „elegendő mértékben" csökkenjen**.

Armijo-feltétel

Legyen $c_1 \in (0,1)$ adott. Azt mondjuk, hogy az α_k lépéshossz teljesíti az Armijo-feltételt, ha

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + \alpha_k c_1 \nabla f_k^T p_k$$

Egy lehetséges algoritmus α_k megválasztására (**visszaléptetéses módszer**):

Legyen $c_1 \in (0,1)$, $\varrho \in (0,1)$ rögzített, $\alpha := \alpha_0$.
while $f(x_k + \alpha p_k) > f(x_k) + \alpha c_1 \nabla f_k^T p_k$
    $\alpha := \varrho\alpha$
end
$\alpha_k = \alpha$, stop.

Vonalmenti keresések - lépéshossz választás

A lépéshossz ne legyen túl rövid:

Valamely $c_2 \in (c_1, 1)$ esetén

$$\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k$$

teljesüljön.

Wolfe-feltételek

Valamely $0 < c_1 < c_2 < 1$ esetén teljesüljön, hogy

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + \alpha_k c_1 \nabla f_k^T p_k,$$
$$\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k$$

A visszaléptetéses módszer általában biztosítja a Wolfe-feltételek teljesülését.

Gradiens módszer visszaléptetéssel

(1) Legyen adott x_0

(2) Ha ismert x_k, akkor legyen $p_k = -\nabla f_k$

(3) Válasszuk α_k-t a visszaléptetéses módszerrel

(4) Legyen $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$.

(5) Leállás: ha $\nabla f_k = 0$ (ha $\|\nabla f_k\| < \varepsilon$)

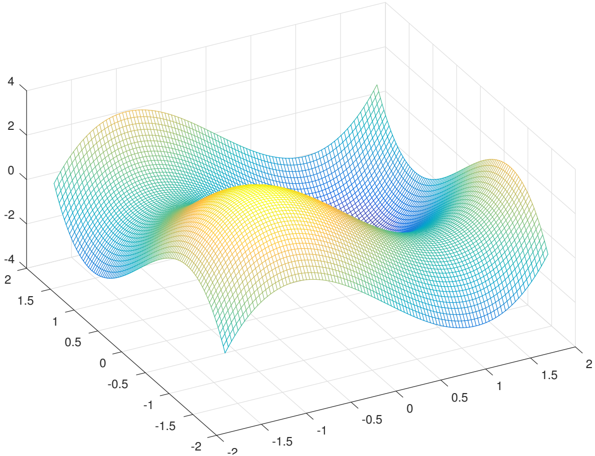
Tétel.

Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható. Ekkor az előző algoritmus vagy véges sok lépésben megáll egy x_k stacionárius pontnál, vagy egy szigorúan monoton csökkenő sorozatot állít elő, melynek minden torlódási pontja stacionárius pont.

Megjegyzés

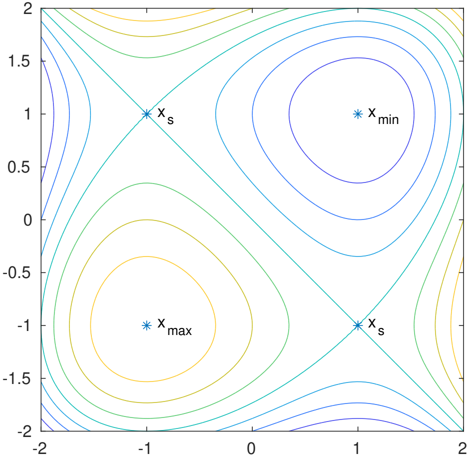
A gradiens módszer nagyon lassú lehet hosszú, elnyújtott völgyek esetén ($\to$ skálázás).

Gradiens módszer



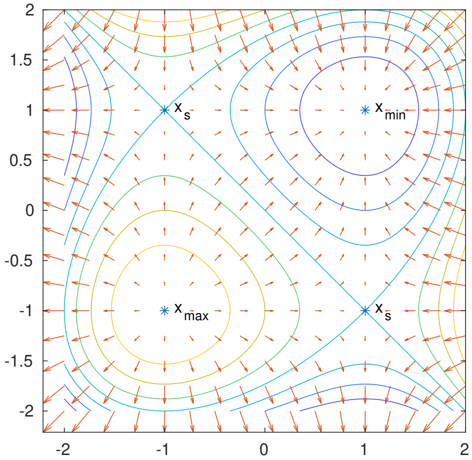
Az $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$ függvény.

Gradiens módszer



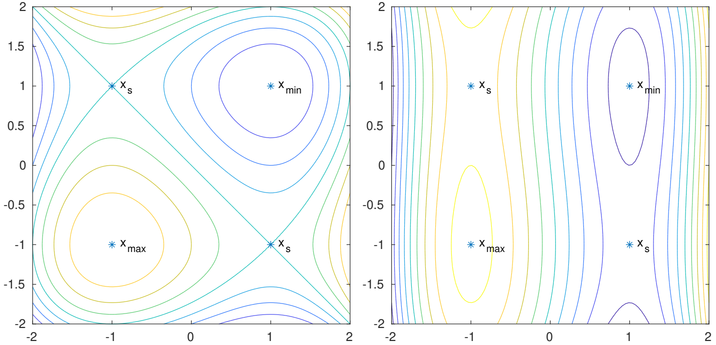
Az $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$ függvény szintvonalai és stacionárius pontjai.

Gradiens módszer



Az $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$ függvény szintvonalai és a negatív gradiens mező.

Gradiens módszer



Az

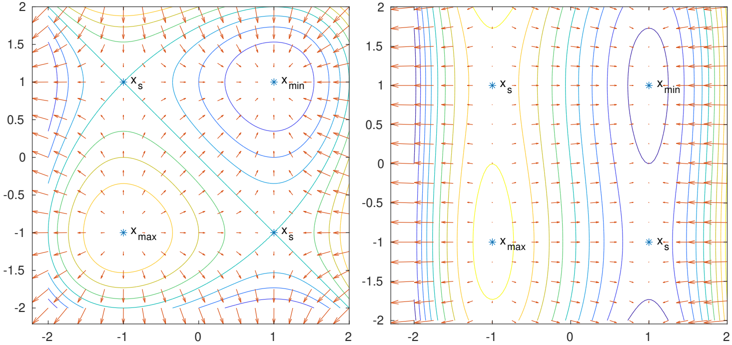
$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$$

és a

$$f(x_1, x_2) = 10x_1^3 + x_2^3 - 30x_1 - 3x_2$$

függvény szintvonalai.

Gradiens módszer



Az

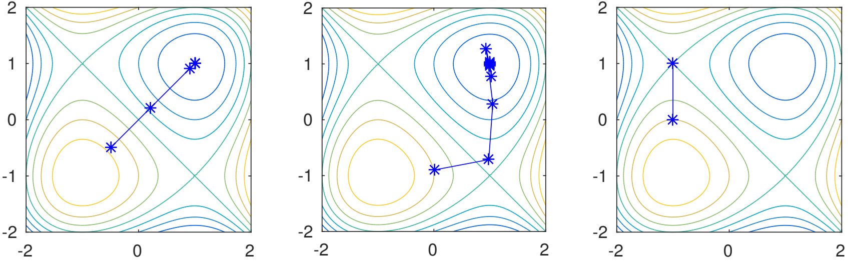
$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$$

és a

$$f(x_1, x_2) = 10x_1^3 + x_2^3 - 30x_1 - 3x_2$$

függvény szintvonalai és a negatív gradiensmezők.

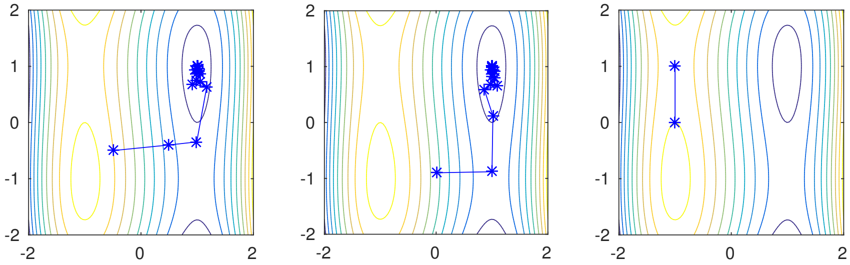
Gradiens módszer



A gradiens módszer az $f(x_1, x_2) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1 - 3x_2$ függvény esetén.

x_0	$(-0.5, -0.5)$	$(0, -0.9)$	$(-1, 0)$
lépés	6	11	2
x^*	$(1.0000, 1.0000)$	$(1.0000, 0.9999)$	$(-1, 1)$

Gradiens módszer



A gradiens módszer az $f(x_1, x_2) = 10x_1^3 + x_2^3 - 30x_1 - 3x_2$ függvény esetén.

x_0	$(-0.5, -0.5)$	$(0, -0.9)$	$(-1, 0)$
lépésszám	36	33	2
x^*	$(1.0000, 0.9999)$	$(1.0000, 1.0001)$	$(-1, 1)$

A gradiens-módszer konvergenciarendje

Az „ideális” esetben, amikor a célfüggvény kvadratikus és egzakt vonalmenti keresést használunk (azaz az adott irány mentén a tényleges minimumot biztosító lépéshosszt választjuk).

Legyen

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x,$$

ahol Q szimmetrikus és pozitív definit. Ekkor $\nabla f(x) = Qx - b$, azaz $Qx^* = b$. Az optimális lépéshossz:

$$\alpha_k = \frac{\nabla f_k^T \nabla f_k}{\nabla f_k^T Q \nabla f_k},$$

azaz

$$x_{k+1} = x_k - \left(\frac{\nabla f_k^T \nabla f_k}{\nabla f_k^T Q \nabla f_k} \right) \nabla f_k$$

A gradiens-módszer konvergenciarendje

Tétel.

Ha az előző kvadratikus függvényre alkalmazzuk a gradiens módszert egzakt vonalmenti kereséssel, és $\|x\|_Q = x^T Qx$ (ez norma lesz), akkor

$$\|x_{k+1} - x^*\|_Q^2 \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2 \|x_k - x^*\|_Q^2,$$

ahol $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$ a Q sajátértékei.

1. Megj.: $Qx^* = b$-ből következik, hogy $\frac{1}{2}\|x_k - x^*\|_Q^2 = f_k - f_*$.

2. Megj.: Ha $\lambda_1 = \lambda_n$, akkor 1 lépésben elérjük az optimumot.
Ahogy nő $\frac{\lambda_n}{\lambda_1}$ úgy válnak egyre elnyújtottabbá az f kontúrvonalai, és egyre ,,cikk-cakk"-osabbá a sorozat.

A gradiens-módszer konvergenciarendje

Példa. Legyen $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x) = x_1^2 + a x_2^2$, ahol $a > 1$. Ekkor $f(x) = x^T Q x$, ahol

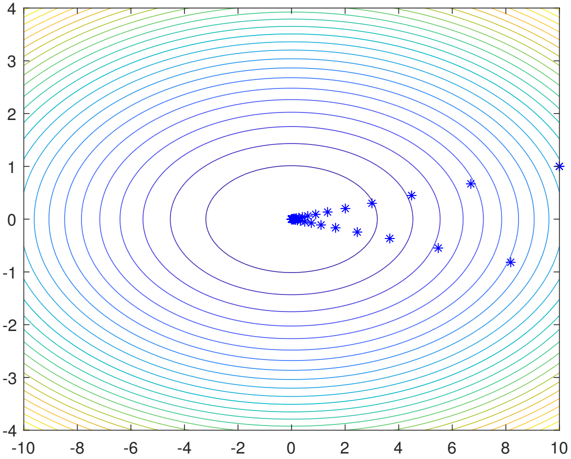
$$Q = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2a \end{pmatrix}$$

Ha $x_0 = (a, 1)^T$, akkor

$$x_k = \begin{cases} \left(\frac{a-1}{a+1}\right)^k \binom{a}{1} & k \text{ páros} \\ \left(\frac{a-1}{a+1}\right)^k \binom{a}{-1} & k \text{ páratlan} \end{cases}$$

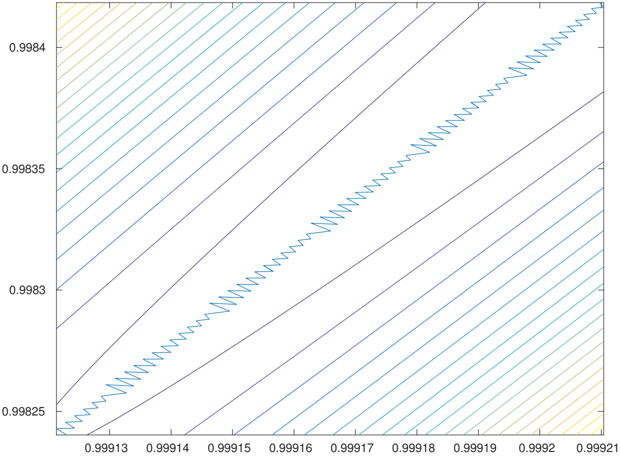
A Q mátrix sajátértékei 2 és $2a$.

Gradiens módszer



A gradiens módszer az $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 10x_2^2$ függvényre.

Gradiens módszer



A visszaléptetéses gradiens módszer a Rosenbrock-függvényre, az utolsó 130 iterált. $x_0 = (-1.2, 1)$, $\varepsilon = 10^{-3}$, $\varrho = 0.5$. Az elvégzett lépések száma 5231.

Newton-módszer nemlineáris egyenletek gyökeinek közelítésére

Emlékeztető:

Az $f(x) = 0$ (ahol $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$) **nemlineáris egyenlet** gyökének közelítésére szolgáló Newton-iteráció:

$$x_0 \text{ adott}, \qquad x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \dots$$

Az $F(x) = 0$ (ahol $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$) **nemlineáris egyenletrendszer** gyökének közelítésére szolgáló Newton-iteráció:

$$x_0 \text{ adott}, \qquad F'(x_k)(x_{k+1} - x_k) = -F(x_k), \qquad k = 0, 1, 2, \dots$$

Newton-módszer optimalizálásra

Az f függvény minimumhelye megoldása a $\nabla f(x) = 0$ egyenletnek. Mivel $\nabla f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, ezért ez egy nemlineáris egyenletrendszer.

Ha f kétszer folytonosan differenciálható, akkor a Newton-módszer a $\nabla f(x) = 0$ egyenletre:

$$x_0 \text{ adott}, \quad \nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = -\nabla f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

azaz

- x_0 adott,
- $\nabla^2 f(x_k) p_k = -\nabla f(x_k)$, (azaz $p_k = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k$)
- $x_{k+1} = x_k + p_k$
- ha $\|\nabla f_k\| < \varepsilon$, akkor leállás

Newton-módszer optimalizálásra

Tétel.

Tfh f kétszer folytonosan differenciálható, $\nabla f(x^*) = 0$, $\nabla^2 f(x^*)$ poz. definit és létezik olyan $L > 0$ konstans, hogy

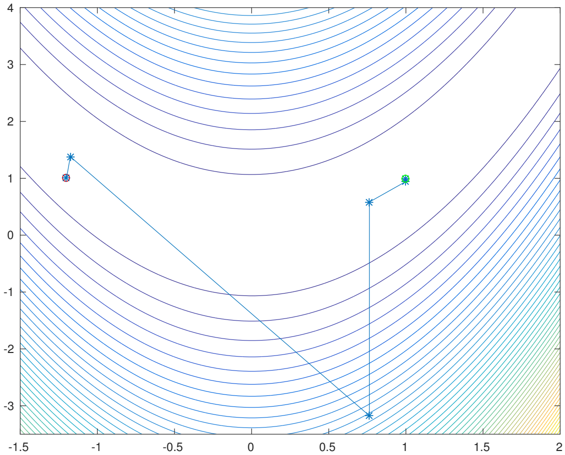
$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x - y\|,$$

$\forall x, y$-ra az x^* egy környezetéből. Ekkor a Newton-iterációt az x^* egy elegendően jó környezetéből indítva az iteráció konvergál x^*-hoz, a konvergencia négyzetes, és az $\{\|\nabla f_k\|\}$ sorozat négyzetesen tart 0-hoz.

Problémák.

- A Hesse-mátrix számítása költséges
- A Hesse mátrix (ha nem a minimumhely egy jó környezetében vagyunk) nem feltétlenül pozitív definit.

Newton-módszer, példa



A Newton-módszer a Rosenbrock-függvényre. $x_0 = (-1.2, 1)$, $x_{opt} = (0.999996, 0.999991)$, $f(x_{opt}) = 1.8 \cdot 10^{-11}$, $k = 5$.

Newton-módszer, másik megközelítésből

A Taylor-sorból:

$$f(x_k + p) \approx f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_k p =: m_k(p)$$

Ha $\nabla^2 f_k$ pozitív definit, akkor $m_k(p)$ minimumhelye

$$p_k^N = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k$$

Newton-irány

Reguláris $\nabla^2 f_k$ esetén a $p_k^N = -(\nabla^2 f_k)^{-1} \nabla f_k$ irányt Newton-iránynak nevezzük.

Ha $\nabla^2 f_k$ pozitív definit, akkor a Newton-irány csökkenési irány:

$$\nabla f_k^T p_k^N = -p_k^{NT} \nabla^2 f_k p_k^N < 0.$$

Ha $\nabla^2 f_k$ nem pozitív definit, akkor előfordulhat, hogy a Newton-irány nem definiált, vagy nem csökkenési irány.

A Newton-irány előnye: a minimumhely elég jó közelítése esetén négyzetes konvergencia, hátránya: szükség van a Hesse-mátrixra.

Kvázi-Newton irány

$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k$, ahol $B_k \approx \nabla^2 f_k$

B_k alkalmas megválasztása esetén nincs szükség a Hesse-mátrixra, de a konvergencia szuperlineáris marad.

Módosított Newton-módszer

Ha $\nabla^2 f_k$ nem pozitív definit, akkor helyettesítsük egy pozitív definit $B_k = \nabla^2 f_k + E_k$ mátrixszal.

- x_0 adott
- $x_k \mapsto x_{k+1}$:
  - $B_k = \nabla^2 f_k + E_k$, ahol $E_k = 0$, ha $\nabla^2 f_k$,,elegendően" pozitív definit, egyébként egy olyan mátrix, hogy B_k ,,elegendően" poz.def. legyen
  - megoldjuk a $B_k p_k = -\nabla f_k$ egyenletrendszert,
  - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k x_k$, ahol α_k-t úgy választjuk, hogy teljesítse a Wolfe feltételeket.
- leállás: ha $\|\nabla f_k\| < \varepsilon$

Módosított Newton-módszer

Tétel

Tfh f kétszer folytonosan differenciálható és x_0 olyan, hogy a $\{x : f(x) \leq f(x_0)\}$ nívóhalmaz kompakt. Ha létezik olyan C, hogy $cond(B_k) \leq C$ minden $k = 1, 2, \ldots$ esetén, akkor

$$\lim \nabla f_k = 0$$

Megjegyzés.
Ha x^* olyan, hogy $\nabla^2 f(x^*)$ elegendően pozitív definit, akkor elég nagy k esetén $E_k = 0$ lesz és $\alpha_k = 1$, a konvergencia pedig négyzetessé válik.

Probléma:
Hogyan találjuk meg a megfelelő B_k mátrixot?

Mátrixok szinguláris felbontása

Tétel.

Tetszőleges $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrixnak létezik

$$A = USV^\top$$

alakú felbontása, ahol $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ és $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonális mátrixok, $S \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pedig egy diagonális mátrix, melynek főátlójában a $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min\{m,n\}} \geq 0$ valós értékek állnak, amiket az A szinguláris értékeinek nevezünk.

Megjegyzés.

- $\sigma_i^2 = \lambda_i(A^T A)$.
- A pozitív sziguláris értékek száma megegyezik az A mátrix r rangjával.

Mátrixok szinguláris felbontása

Legyen A rangja r, ekkor a szinguláris felbontás:

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^\top,$$

ahol u_i, illetve v_i rendre az U, illetve V mátrix i-edik oszlopa.

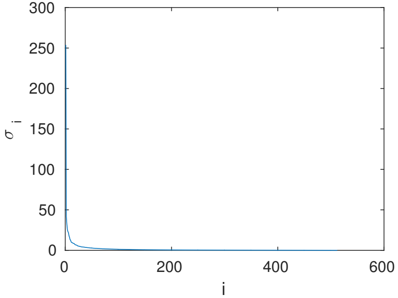
Az A mátrixot 1-rangú mátrixok összegére bontottuk.

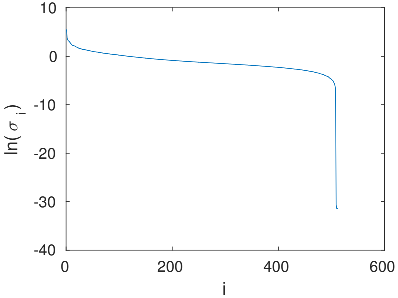
A szinguláris értékek monoton csökkenő módon követik egymást $\rightarrow$ az összegben szereplő mátrixok súlya ugyanígy monoton csökken.

Szinguláris felbontás, példa.

512×512 pixeles kép $\to A \in \mathbb{R}^{512\times 512}$.

Szinguláris felbontás, példa.





Az A mátrix szinguláris értékei normál, és logaritmikus skálán.
$\sigma_1 = 253.87$.

Szinguláris felbontás, példa.

A B mátrix

Hagyjuk el az utolsó 112 szinguláris értékhez tartozó 1-rangú mátrixot.

A $B = \sum_{i=1}^{400} \sigma_i u_i v_i^T$ mátrix ($\sigma_{400} = 0.1021$).

Szinguláris felbontás, példa.

A B mátrix

Hagyjuk el az utolsó 312 szinguláris értékhez tartozó 1-rangú mátrixot.

A $B = \sum_{i=1}^{200} \sigma_i u_i v_i^T$ mátrix ($\sigma_{200} = 0.4265$).

Szinguláris felbontás, példa.

A B mátrix

Hagyjuk el az utolsó 412 szinguláris értékhez tartozó 1-rangú mátrixot.

A $B = \sum_{i=1}^{100} \sigma_i u_i v_i^T$ mátrix ($\sigma_{100} = 1.2676$).

Szinguláris felbontás, példa.

A B mátrix

Hagyjuk el az utolsó 462 szinguláris értékhez tartozó 1-rangú mátrixot.

A $B = \sum_{i=1}^{50} \sigma_i u_i v_i^T$ mátrix ($\sigma_{50} = 2.7572$).

Szimmetrikus mátrixok spektrálfelbontása

Tétel.

Legyen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ egy szimmetrikus mátrix, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ az A (valós) sajátértékei, $q_1, q_2, \ldots, q_n$ pedig a megfelelő ortonormált sajátvektorok. Az A mátrix spektrálfelbontása

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i q_i q_i^\top .$$

Mátrixos alakban

$$A = Q\Lambda Q^\top,$$

ahol Q az az ortogonális mátrix melynek oszlopai a $q_1, q_2, \ldots, q_n$ saját-vektorok és $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$.

Megjegyzés. Szimmetrikus, pozitív definit mátrix esetén a spektrálfelbontás éppen a szinguláris felbontással egyenlő.

Módosított Newton-módszer

Hogyan válasszuk meg a B_k mátrixot?

Legyen $\nabla^2 f_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i q_i q_i^T$ a Hesse-mátrix spektrálfelbontása.

Lehetőségek:

- a negatív sajátértékeket kicsi pozitív értékekre cseréljük,
- elhagyjuk a negatív sajátértékekhez tartozó tagjait a keresési iránynak
- minden sajátértéket eltolunk: $Q(\Lambda + diag(\tau_i))Q^T$

Megj.:
A spektrálfelbontás költséges. Egy egyszerűbb megoldás: $B_k = \nabla^2 f_k + \tau E$

Kvázi-Newton módszerek

Emlékeztető:

$$f(x_k + p) \approx f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_k p.$$

Az f közelítésére az

$$m_k(p) = f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T B_k p$$

kvadratikus modellfüggvényt használjuk, ahol a B_k mátrix szimmetrikus és pozitív definit.

Ekkor az $x_k \mapsto x_{k+1}$ stratégia:

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k \quad \text{(az egzakt minimumhely)},$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \quad \text{(Wolfe-feltételek!)}.$$

Kvázi-Newton módszerek

B_k **módosítása**

A szelő egyenlet:

$$B_{k+1}s_k = y_k,$$

ahol $s_k = x_{k+1} - x_k$ és $y_k = \nabla f_{k+1} - \nabla f_k$.

Ez csak akkor megoldható, ha

$$s_k^T y_k > 0$$

(görbületi feltétel).

A B_{k+1} meghatározásához tekintsük a

$$\min_B \|B - B_k\|,$$

feladatot a $B^T = B$ és $Bs_k = y_k$ feltételek mellett.

Kvázi-Newton módszerek

Különböző normák $\min_B \|B - B_k\| \implies$ különböző módszerek.

Súlyozott Frobenius-norma $\implies$ **Davidon-Fletcher-Powell** (DFP) formula:

$$B_{k+1} = \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k} \right) B_k \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right) + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}.$$

Ekkor a $H_k = B_k^{-1}$ jelölést használva:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$$

Kvázi-Newton módszerek

B_k helyett H_k-ra alkalmazva a feltételeket:
Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) módszer

$$H_{k+1} = \left(I - \frac{s_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right) H_k \left(I - \frac{y_k s_k^T}{y_k^T s_k} \right) + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}.$$

vagy

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k H_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}$$

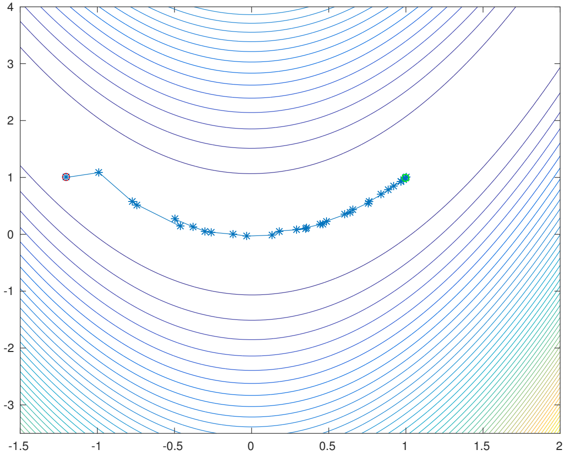
Megfelelő feltételek teljesülése esetén a BFGS algoritmus szuperlineáris rendben konvergál x^*-hoz.

Kvázi-Newton módszerek

A BFGS algoritmus előnyei:

- szuperlineáris konvergencia
- skálázás-invariáns
- ,,önjavító'': ha H_k nem túl jól approximálja a Hesse-mátrix inverzét, pl. $y_k^T s_k$ pozitív, de 0-hoz közeli, az iteráció általában néhány lépés után korrigálja a hibát (megfelelő vonalmenti keresés esetén).

BFGS módszer, példa.



BFGS módszer a Rosenbrock függvényre. $x_0 = (-1.2, 1)$, $k = 32$, $x_{opt} = (0.9999997, 0.9999993)$, $f(x_{opt}) = 1.87 \cdot 10^{-13}$.

Kvázi-Newton módszerek

A szimmetrikus 1-rangú formula (SR1)

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}$$

és

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k}$$

Az algoritmus a Hesse-mátrix jó approximációját adja.

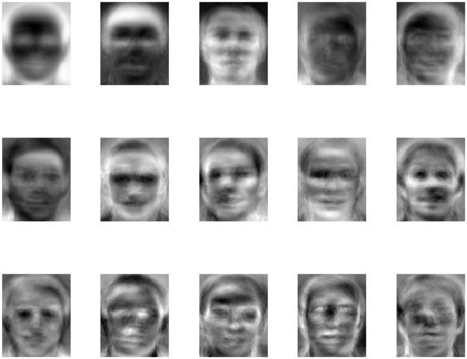
Hátrányai:

- nem biztos, hogy B_{k+1} pozitív definit
- a nevező 0 is lehet

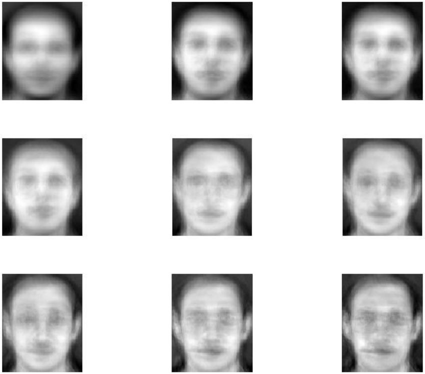
Kiegészítő anyag: arcfelismerés, SVD

Olivetti adatbázis: 40x10 pgm kép.
A: az i-edik oszlopában az i-edik kép vektoralakban.

Készítsük el az A szinguláris felbontását: $A = USV^T$.
Az U oszlopai: ,,eigenfaces''. Az első 15:



Képek rekonstrukciója az U első 1, 3, 5, 8, 10, 15, 20, 30, 40 oszlopából:



Eredeti kép:

Képek rekonstrukciója az U első 1, 3, 5, 8, 10, 15, 20, 30, 40 oszlopából:

Eredeti kép:

Képek rekonstrukciója az U első 1, 3, 5, 8, 10, 15, 20, 30, 40 oszlopából:

Eredeti kép:

Feltételes optimalizálás

A feladat:

Keresett

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{amikor} \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases}$$

ahol f és c_i sima, valós értékű függvények.

- f: célfüggvény
- c_i: feltétel függvények
- $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) = 0 \text{ ha } i \in \mathcal{E}, \quad c_i(x) \geq 0 \text{ ha } i \in \mathcal{I}\}$: megengedett pontok halmaza
- x megengedett, ha $x \in \Omega$

Aktív halmaz

Adott x megengedett pont esetén

$$\mathcal{A}(x) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} : c_i(x) = 0\}$$

Egy x megengedett pont esetén az $i \in \mathcal{I}$ egyenlőtlenség aktív, ha $c_i(x) = 0$, és inaktív ha $c_i(x) > 0$.

Lokális megoldás

$x^* \in \mathbb{R}$ lokális megoldás, ha $x^* \in \Omega$ és létezik x^*-nak olyan N környezete, hogy $f(x) \geq f(x^*)$ for $x \in \Omega \cap N$.

Szigorú lokális megoldás

$x^* \in \mathbb{R}$ szigorú lokális megoldás, ha $x^* \in \Omega$ és létezik x^*-nak olyan N környezete, hogy $f(x) > f(x^*)$ ha $x \in \Omega \cap N$, $x \neq x^*$.

LICQ (linear independence constraint qualification)

Adott $x \in \Omega$ és $\mathcal{A}(x)$ esetén azt mondjuk, hogy a LICQ feltételek teljesülnek, ha az aktív feltételek gradiensei lineárisan függetlenek, azaz a

$$\{\nabla c_i(x) : i \in \mathcal{A}(x)\}$$

halmaz elemei lineárisan függetlenek.

Lagrange-függvény

A feltételes minimalizálási feladat Lagrange-függvénye

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x)$$

Elsőrendű szükséges feltételek (Karush-Kuhn-Tucker feltételek)

Tfh x^* lokális megoldás, f és c_i folytonosan differenciálható, továbbá a LICQ feltételek teljesülnek x^*-ban. Ekkor létezik olyan λ^*, hogy az alábbi feltételek teljesülnek:

- $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0$,
- $c_i(x^*) = 0$ minden $i \in \mathcal{E}$ esetén,
- $c_i(x^*) \geq 0$ minden $i \in \mathcal{I}$ esetén,
- $\lambda_i^* \geq 0$ minden $i \in \mathcal{I}$ esetén,
- $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$ minden $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ esetén.

Egyenlőségekkel adott feltételek

Tegyük fel, hogy egyetlen feltétel van és az egyenlőséggel adott:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{amikor } c(x) = 0.$$

Ekkor a Lagrange-függvény:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda c(x).$$

Legyen x egy megengedett pont, vizsgáljuk meg, hogy innen δx-et elmozdulva a megengedett pontok halmazában hogy változik az f értéke.

$$f(x + \delta x) \approx f(x) + \nabla^T f(x) \cdot \delta x$$

Ha csökkenési irányban szeretnénk elmozdulni, akkor kicsi δx esetén teljesülni kell, hogy

$$\nabla^T f(x) \cdot \delta x < 0$$

Mivel

$$c(x+\delta x) \approx c(x) + \nabla^T c(x) \cdot \delta x,$$

így ha azt szeretnénk, hogy x mellett $x+\delta x$ is megengedett legyen (azaz $c(x)=0$ mellett $c(x+\delta x)=0$ is teljesüljön), akkor a

$$\nabla^T c(x) \cdot \delta x = 0$$

feltételnek is teljesülni kell. Azaz amíg egy adott x pont esetén tudunk olyan δx irányt választani, hogy

$$\nabla^T f(x) \cdot \delta x < 0 \quad \text{és} \quad \nabla^T c(x) \cdot \delta x = 0,$$

addig tudjuk csökkenteni az f értékét a megengedett tartományon belül.

Ilyen δx irány csak akkor nem létezik, ha valamely λ esetén $\nabla f(x) = \lambda \nabla c(x)$, azaz

$$\nabla_x \mathcal{L}(x,\lambda) = 0.$$

Tehát egy x^* pont akkor lehet lokális minimumhely, ha valamely λ^* esetén

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0.$$

(KKT 1. feltétel.)

A KKT 2. feltétel ($c(x^*) = 0$) ekvivalens azzal, hogy

$$\nabla_\lambda \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0,$$

és a KKT 5. feltétel is automatikusan teljesül.

A több egyenlőséggel adott feltételrendszer esete ugyanígy vizsgálható.

Megjegyzés: Az, hogy KKT feltételekkel megtalált pont valóban lokális minimumhely, további vizsgálatokat igényel.

Egyenlőtlenségekkel adott feltételek

Tegyük fel, hogy egyetlen feltétel van és az egyenlőtlenséggel adott:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \text{amikor } c(x) \geq 0.$$

Ekkor a Lagrange-függvény:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda c(x).$$

Legyen x egy megengedett pont, vizsgáljuk meg, hogy innen δx-et elmozdulva a megengedett pontok halmazában hogy változik az f értéke.

Ha csökkenési irányban szeretnénk elmozdulni, akkor kicsi δx esetén teljesülni kell, hogy

$$\nabla^T f(x) \cdot \delta x < 0$$

Mivel

$$c(x + \delta x) \approx c(x) + \nabla^T c(x) \cdot \delta x,$$

ahhoz, hogy a megengedett tartományban maradjunk teljesülnie kell a

$$c(x) + \nabla^T c(x) \cdot \delta x \geq 0$$

feltételnek.

1. eset: ha $c(x) > 0$, akkor kellően kicsi δx esetén a fenti feltétel teljesül. Ekkor ha x minimumhely $\nabla f(x) = 0$.

2. eset: ha $c(x) = 0$ (a feltétel aktív), akkor $\nabla^T c(x) \cdot \delta x \geq 0$ kell, ami a $\nabla^T f(x) \cdot \delta x < 0$ feltétellel egyszerre csak akkor nem teljesülhet, ha $\nabla f(x)$ és $\nabla c(x)$ ugyanabba az irányba mutat, azaz

$$\nabla f(x) = \lambda \nabla c(x), \quad \text{valamely } \lambda \geq 0 \text{ esetén}$$

Ez utóbbi feltétel azt jelenti, hogy ha x^* lokális minimumhely, akkor valamely $\lambda^* \geq 0$ esetén

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0,$$

(KKT 1. és 4. feltétel.)
és

$$\lambda^* c(x^*) = 0,$$

(KKT 5. feltétel.)
továbbá teljesül a korlátozó feltétel:

$$c(x^*) \geq 0$$

(KKT 3. feltétel)

A LICQ feltételek

Egy példa arra, hogy ha a minimumhelyen a feltételfüggvények gradiensei párhuzamosak, akkor a KKT feltételek nem feltétlenül teljesülnek.

Keresett az

$$f(x) = x_1 + x_2 + x_3^2$$

minimuma az

$$c_1(x) = x_1 - 1 = 0, \quad c_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

feltételek mellett.
A megoldás az $x^* = (1, 0, 0)$ pont, ebben a pontban

$$\nabla c_1(x^*) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

és

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_2}(x^*, \lambda^*) = 1$$

tetszőleges λ^* esetén.

Példa

Határozza meg az

$$f(x) = x_1^2 + 3x_1x_2 + x_2^2 - x_1 + x_2$$

függvény minimumhelyét az

$$x_1^2 + x_2^2 = \frac{1}{9}$$

feltétel mellett.

A Lagrange-függvény:

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = x_1^2 + 3x_1x_2 + x_2^2 - x_1 + x_2 - \lambda(x_1^2 + x_2^2 - \frac{1}{9})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 2x_1 + 3x_2 - 1 - 2\lambda x_1 = 0$$
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_2} = 3x_1 + 2x_2 + 1 - 2\lambda x_2 = 0$$

Az előző két egyenletet összeadva és rendezve:

$$(x_1 + x_2)(5 - 2\lambda) = 0$$

1. eset: ha $x_1 = -x_2$, akkor a korlátozó feltételből

$$2x_1^2 = \frac{1}{9}$$
$$x_1^2 = \frac{1}{18}$$
$$x_1 = \pm\frac{1}{3\sqrt{2}}$$

A lehetséges pontok:

$$\left(\frac{1}{3\sqrt{2}}, -\frac{1}{3\sqrt{2}}\right), \quad \left(-\frac{1}{3\sqrt{2}}, \frac{1}{3\sqrt{2}}\right)$$

2. eset: ha $\lambda = \frac{5}{2}$, akkor $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 0$-ból

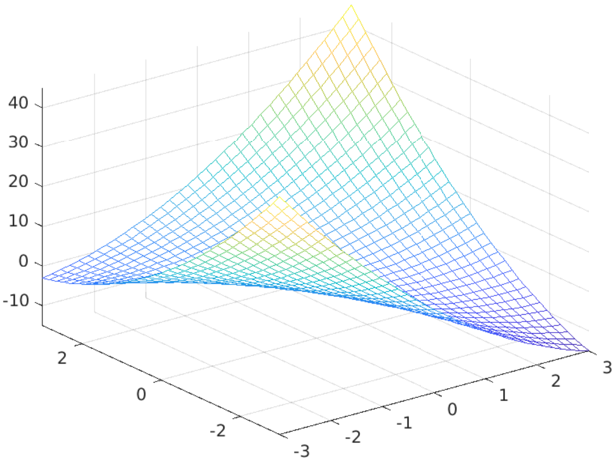
$$-3x_1 + 3x_2 = 1$$
$$x_2 = \frac{1}{3} + x_1$$

Ezt a korlátozó feltételbe visszahelyettesítve:

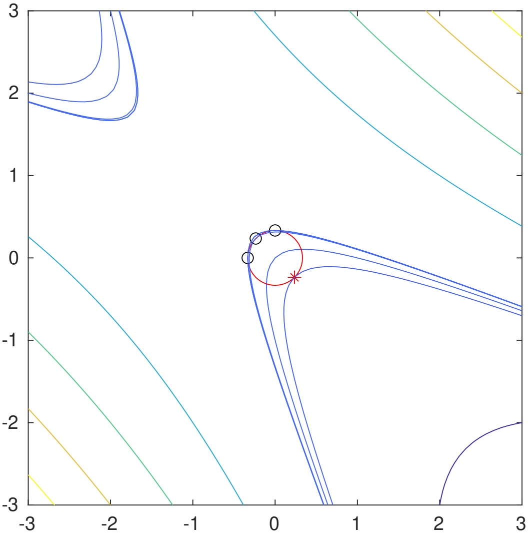
$$x_1^2 + \frac{1}{9} + \frac{2}{3}x_1 + x_1^2 - \frac{1}{9} = 0$$
$$2x_1(x_1 + \frac{1}{3}) = 0$$

A lehetséges pontok:

$$\left(0, \frac{1}{3}\right), \quad \left(-\frac{1}{3}, 0\right)$$



Az $f(x) = x_1^2 + 3x_1x_2 + x_2^2 - x_1 + x_2$ függvény



Az $f(x) = x_1^2 + 3x_1x_2 + x_2^2 - x_1 + x_2$ függvény szintvonalai, a korlátozó feltétel és a 4 meghatározott pont.

Példa

Határozza meg az

$$f(x) = (x_1 - 2)^2 + 2(x_2 - 1)^2$$

függvény minimumát az

$$\begin{aligned} x_1 + 4x_2 &\leq 3 \\ x_1 &\geq x_2 \end{aligned}$$

korlátozó feltételek mellett.

A Largange-függvény:

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = (x_1 - 2)^2 + 2(x_2 - 1)^2 - \lambda_1 \underbrace{(3 - x_1 - 4x_2)}_{c_1(x)} - \lambda_2 \underbrace{(x_1 - x_2)}_{c_2(x)}$$

A KKT feltételek:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_2} = 0, \quad \lambda_1(3 - x_1 - 4x_2) = 0, \quad \lambda_2(x_1 - x_2) = 0, \quad \lambda_1, \lambda_2 \geq 0$$

$$2(x_1 - 2) + \lambda_1 - \lambda_2 = 0 \tag{1}$$
$$4(x_2 - 1) + 4\lambda_1 + \lambda_2 = 0 \tag{2}$$
$$\lambda_1(3 - x_1 - 4x_2) = 0 \tag{3}$$
$$\lambda_2(x_1 - x_2) = 0 \tag{4}$$
$$\lambda_1, \lambda_2 \geq 0 \tag{5}$$

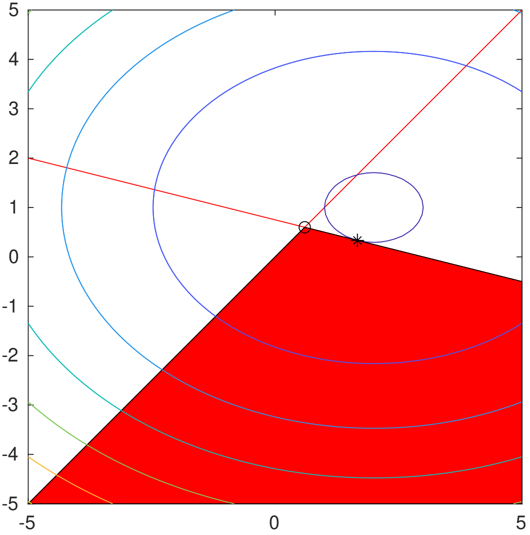
1. eset: ha $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, ekkor
(1), (2) $\implies$ $x_1 = 2, x_2 = 1$, ami nem megengedett pont (a feltétel nélküli feladat megoldása)

2. eset: ha $\lambda_1 = 0, \lambda_2 \neq 0$, ekkor
(4) $\implies$ $x_1 = x_2$
(1)+(2) $\implies$ $x_1 = x_2 = \frac{4}{3}$
(1) $\implies$ $\lambda_2 = -\frac{4}{3}$, ami ellentmond (5)-nek.

$$
\begin{aligned}
2(x_1 - 2) + \lambda_1 - \lambda_2 &= 0 && (1)\\
4(x_2 - 1) + 4\lambda_1 + \lambda_2 &= 0 && (2)\\
\lambda_1(3 - x_1 - 4x_2) &= 0 && (3)\\
\lambda_2(x_1 - x_2) &= 0 && (4)\\
\lambda_1, \lambda_2 &\geq 0 && (5)
\end{aligned}
$$

3. eset: ha $\lambda_1 \neq 0, \lambda_2 = 0$, ekkor
(3) $\implies 3 - x_1 - 4x_2 = 0$,
(2)-4· (1) $\implies x_1 = \frac{5}{3}, x_2 = \frac{1}{3}, \lambda_1 = \frac{2}{3}$

4. eset: ha $\lambda_1 \neq 0, \lambda_2 \neq 0$, ekkor
(3), (4) $\implies x_1 = x_2$ és $3 - x_1 - 4x_2 = 0 \implies x_1 = x_2 = \frac{3}{5}$
(1), (2) $\implies \lambda_1 = \frac{22}{25}, \lambda_2 = -\frac{48}{25}$, ami ellentmond (5)-nek


5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-5
0
5

Példa

Határozza meg az

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2$$

függvény minimumhelyét az

$$x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 = 3$$

feltétel mellett.

A Lagrange-függvény:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = x_1^2 + x_2^2 - \lambda(x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 - 3)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 2x_1 - \lambda(2x_1 + x_2) = 0$$
$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_2} = 2x_2 - \lambda(2x_2 + x_1) = 0$$

Az előző két egyenletet összeadva és rendezve:

$$(x_1 + x_2)(2 - 3\lambda) = 0$$

1. eset: ha $x_1 = -x_2$, akkor a korlátozó feltételből

$$x_1^2 = 3$$
$$x_1 = \pm\sqrt{3}$$

A lehetséges pontok:

$$\left(\sqrt{3}, -\sqrt{3}\right), \quad \left(-\sqrt{3}, \sqrt{3}\right)$$

2. eset: ha $\lambda = \frac{2}{3}$, akkor $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_1} = 0$-ból

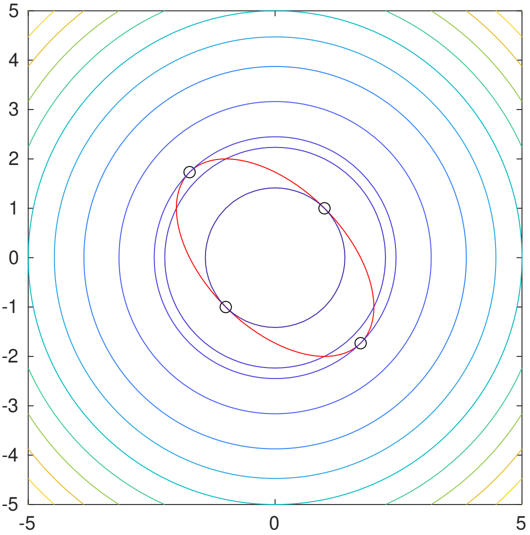
$$2x_1 - \frac{2}{3}(2x_1 + x_2) = 0$$
$$x_1 = x_2$$

Ezt a korlátozó feltételbe visszahelyettesítve:

$$3x_1^2 = 3$$
$$x_1 = \pm 1$$

A lehetséges pontok:

$$(1, 1), \quad (-1, -1)$$



Az $f(x) = x_1^2 + x_2^2$ függvény szintvonalai, a korlátozó feltétel és a 4 meghatározott pont.

Példa

Határozza meg az

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + x_2 - 2$$

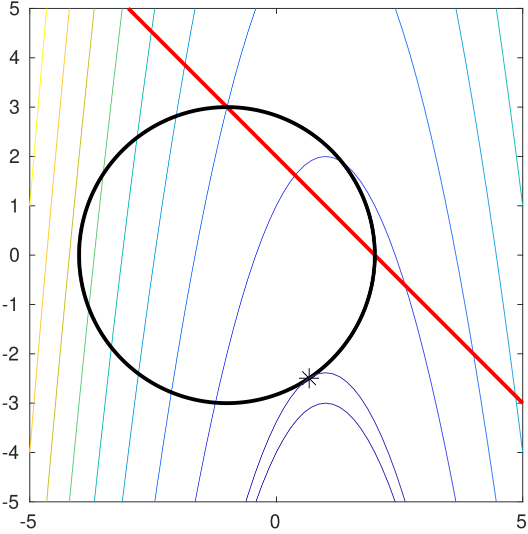
függvény minimumát az

$$x_1 + x_2 - 2 \leq 0, \quad (x_1 + 1)^2 + x_2^2 \leq 9$$

feltételek mellett.

Matlab-bal:

$$x_{opt} = \begin{pmatrix} 0.6661 \\ -2.4948 \end{pmatrix}, \quad f_{opt} = -4.3833, \quad \lambda = \begin{pmatrix} 5.2236 \cdot 10^{-9} \\ 0.2004 \end{pmatrix}$$


5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-5
0
5

Büntető függvények módszere

A feladat: keresett

$$\min_x f(x) \text{ ha } c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$$

ahol f és c_i kétszer folytonosan differenciálhatóak.
Legyen

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= 0 \text{ ha } x \text{ megengedett}\\ \Phi(x) &> 0 \text{ egyébként,}\end{aligned}$$

és

$$F(x, \alpha) = f(x) + \alpha\Phi(x),$$

ahol $\alpha > 0$ a büntető paraméter.
Az új feladat („penalty problem"): keresett

$$\min_x F(x, \alpha_k)$$

az α_k paraméterek valamilyen monoton növekvő, végtelenhez tartó sorozata esetén.

Büntető függvények módszere

Az algoritmus:

1. Legyen $k = 0$, $\alpha_0 > 0$
2. meghatározzuk a $\min_x F(x, \alpha_k)$ feladat x_k megoldását.
3. ha x_k megengedett, akkor leállás
4. legyen $\alpha_{k+1} > \alpha_k$
5. legyen $k = k + 1$ és $\to$ (2)

tipiksan az α_{k+1} értékét az $[1.4\alpha_k, 10\alpha_k]$ intervallumból választjuk.

Kvadratikus büntető tag

$$F(x, \alpha) = f(x) + \frac{\alpha}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x)^2 = f(x) + \frac{\alpha}{2} c(x)^T c(x),$$

ahol $c(x) = (c_1(x), \ldots, c_{|\mathcal{E}|}(x))$.

Büntető függvények módszere

Kvadratikus büntető tag

A módszer alkalmazható egyenlőtlenséggel adott korlátozó feltételek esetén is:

$$F(x, \alpha) = f(x) + \frac{\alpha}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x)^2 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i \in \mathcal{I}} (\max[0, -c_i(x)])^2$$

A feladat gyakran rosszul kondícionált: ha $\alpha_k \to \infty$ akkor $x^*(\alpha_k) \to x^*$, de $cond(\nabla_x^2 F(x, \alpha_k)) \to \infty$.

Belsőpontos módszerek

A feladat: keresett

$$\min_x f(x) \text{ ha } c_i(x) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I},$$

ahol f és c_i kétszer folytonosan differenciálhatóak.

Az ötlet: használjunk olyan büntető tagot, mely tart végtelenhez, ha x tart a “nem megengedett” állapothoz.

Logaritmikus korlát

$$F(x, \alpha) = f(x) - \alpha \sum_{i \in I} \log c_i(x),$$

ahol $\alpha > 0$.

Inverz korlát

$$F(x, \alpha) = f(x) + \alpha \sum_{i \in I} \frac{1}{c_i(x)},$$

ahol $\alpha > 0$.

Megbízhatósági tartomány módszerek

- a célfüggvényt egy kvadratikus modellfüggvénnyel helyettesítjük
- meghatározzuk a megbízhatósági tartományt
- ezen tartományon belül kiszámítjuk a köv. iteráltat

A megbízhatósági tartomány mérete

- túl kicsi $\rightarrow$ az algoritmus nem tud lényegi lépést tenni
- túl nagy $\rightarrow$ a célfüggvény és a modellfüggvény minimumhelye nagyon különbözhet

A modellfüggvény

$$f(x_k + p) \approx f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_k p$$

$$m_k(p) = f_k + g_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p,$$

ahol $g_k = \nabla f_k$ és $B_k \approx \nabla^2 f_k$.

Megbízhatósági tartomány módszerek

Az $m_k(p)$ és $f(x_k + p)$ közötti különbség

- $O(\|p\|^3)$ ha $B_k = \nabla^2 f_k$ (megbízh. tart. Newton módszer)
- $O(\|p\|^2)$ egyébként

Az $x_k \mapsto x_{k+1}$ lépés: keressük meg a

$$\min_p m_k(p) = \min_p (f_k + g_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p), \text{ ahol } \|p\| \leq \Delta_k$$

feladat megoldását. (Feltételes optimalizálás.)

Ha B_k pozitív definit és $\|B_k^{-1} g_k\| \leq \Delta_k$ akkor $p_k = B_k^{-1} g_k$ az egzakt minimumhely (teljes lépés, a feltétel inaktív).

Megbízhatósági tartomány módszerek

A megbízhatósági tartomány Δ_k sugarának megválasztása:

$$\varrho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p)}{m(0) - m(p)}$$

- ha $\varrho_k < 0$ akkor $f(x_k + p) > f(x_k)$, elvetjük a lépést
- ha $\varrho_k \approx 1$ akkor a modell jól közelíti f-et, a köv lépésben megnöveljük a tartományt
- ha $\varrho_k > 0$ de $\varrho_k << 1$ akkor a köv lépésben ugyanezt a sugarat használjuk
- ha $\varrho_k \approx 0$ akkor a köv lépésben csökkentjük a sugarat

Adottak $\hat{\Delta} > 0$, $\Delta_0 \in (0, \hat{\Delta})$, $\eta \in [0, 0.25)$

for $k = 0, 1, 2, \ldots$

  meghatározzuk p_k-t

  kiszámítjuk ϱ_k-t

  if $\varrho_k < \frac{1}{4}$

    $\Delta_{k+1} = \frac{1}{4}\Delta_k$

  else

    if $\varrho_k > \frac{3}{4}$ and $\|p_k\| = \Delta_k$

      $\Delta_{k+1} = \min(2\Delta_k, \hat{\Delta})$

    else

      $\Delta_{k+1} = \Delta_k$

    end

  end

  if $\varrho_k > \eta$

    $x_{k+1} = x_k + p_k$

  else

    $x_{k+1} = x_k$

  end

Tétel

A p^* vektor pontosan akkor oldja meg a

$$\min_p m(p) = \min_p (f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p), \text{ ahol } \|p\| \leq \Delta$$

feladatot, ha létezik olyan $\lambda \geq 0$ konstans, hogy

$$(B + \lambda I)p^* = -g$$

$$\lambda(\Delta - \|p^*\|) = 0$$

és $(B + \lambda I)$ pozitív definit.

Megjegyzés. Ha Δ olyan, hogy $\|p^*\| < \Delta$, akkor $\lambda = 0$, $Bp^* = -g$ és B poz.def. Ha p^* a tartomány peremén van, akkor λ pozitív is lehet, és $\lambda p^* = -Bp^* - g = -\nabla m(p^*)$ (azaz p^* párhuzamos az m negatív gradiensével).

A

$$\min_p m(p) = \min_p \left(f + g^T p + \frac{1}{2} p^T B p\right), \text{ ahol } \|p\| \leq \Delta$$

problémának általában egy közelítő megoldását keressük meg, amely a modellfv-ben legalább akkora csökkenést eredményez, mint a Cauchy-pont.

Cauchy-pont: a modellfüggvény minimumhelye a negatív gradiens irányában, a megbízhatósági tartományon belül.

$$p_k^C = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|g_k\|} g_k$$

$$\tau_k = \begin{cases} 1 & \text{ha } g_k^T B_k g_k \leq 0 \\ \min\left(\frac{\|g_k\|^3}{\Delta_k g_k^T B_k g_k}, 1\right) & \text{egyébként} \end{cases}$$

A Powel-féle dogleg módszer

Ha B pozitív definit, akkor $p^B = -B^{-1}g$ az m_k feltétel nélküli minimumhelye.
Legyen p^U a legmeredekebb csökkenés irányában a minimumhely:

$$p^U = -\frac{g^T g}{g^T B g} g,$$

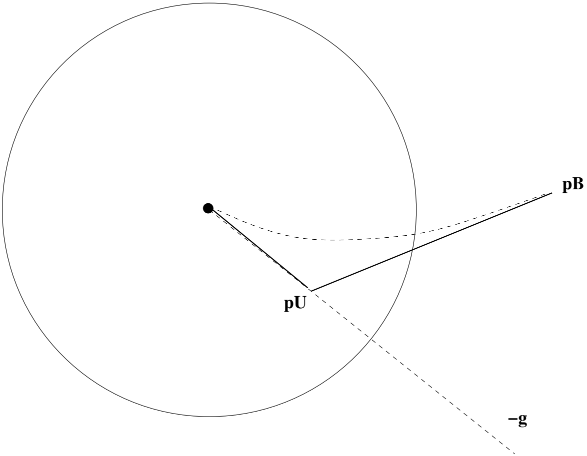
és legyen

$$\tilde{p}(\tau) = \begin{cases} \tau p^U, & 0 \leq \tau \leq 1 \\ p^U + (\tau - 1)(p^B - p^U), & 1 < \tau \leq 2 \end{cases}$$

p_k: az m_k minimumhelye a $\tilde{p}(\tau)$ görbe mentén, a tartományon belül.

Ha $\|p^B\| < \Delta_k$ akkor $p_k = p^B$, egyébként p_k a tartomány határvonalának és a "dogleg" görbének a metszéspontja.

A dogleg módszer



Konjugált gradiens módszer lineáris esetben

Ha A szimmetrikus és pozitív definit, akkor az

$$Ax = b$$

lineáris egyenletrendszer megoldása ekvivalens a

$$\Phi(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$$

kvadratikus fv minimumhelyének megkeresésével, továbbá

$$r(x) := Ax - b = \nabla\Phi(x)$$

Jelölés: $r_k = r(x_k)$.

Konjugált vektorok

Legyen A egy szimmetrikus, pozitív definit mátrix. A $p_1, \ldots, p_m$ nemnulla vektorokat A-konjugáltaknak nevezzük, ha

$$p_i^T A p_j = 0, \quad \forall i \neq j \text{ esetén.}$$

Megjegyzés. Az A-konjugált vektorok lineárisan függetlenek.

Konjugált irányok módszere:
Adott $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$ és $p_0, \ldots, p_{n-1}$ A-konjugált vektorok esetén

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k,$$

ahol α_k a $\alpha \mapsto \Phi(x_k + \alpha p_k)$ minimumhelye:

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

Tétel

Tetszőleges $x_0 \in \mathbb{R}^n$ esetén az előbb definiált konjugált irányok módszere legfeljebb n lépés után megáll az $Ax = b$ egyenletrendszer x^* gyökével.

Megjegyzés. A konjugált irányok módszere esetén

$$r_k^T p_i = 0, \quad i = 0, 1, \ldots, k-1,$$

azaz a k-adik maradékvektor ortogonális az összes korábbi irányra, továbbá x_k a Φ minimumhelye az

$$\{x_0 + span\{p_0, p_1, \ldots, p_{k-1}\}\}$$

halmaz fölött.

Konjugált gradiens módszer lineáris esetben

Konjugált gradiens módszer: konjugált irányok módszere, speciális irányválasztással.

Legyen p_k a legmeredekebb csökkenési irány $(-r_k)$ és az előző irány lineáris kombinációja,

$$p_k = -r_k + \beta_k p_{k-1},$$

úgy, hogy p_k és p_{k-1} A-konjugáltak legyenek:

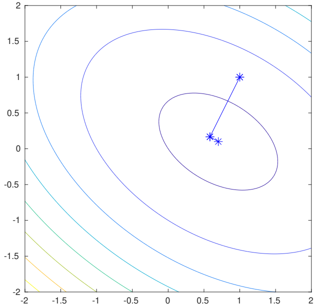
$$\beta_k = \frac{r_k^T A p_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}.$$

$p_0 := -r_0 = b - Ax_0.$

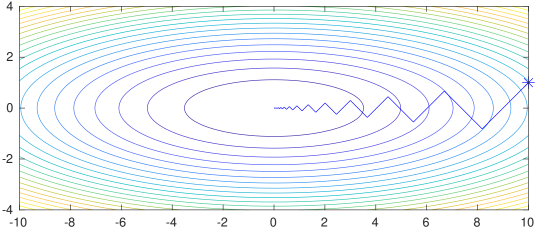
Megjegyzés: p_k meghatározásához csak az utolsó irány szükséges, ennek ellenére p_k az összes korábbi iránnyal A-konjugált lesz.

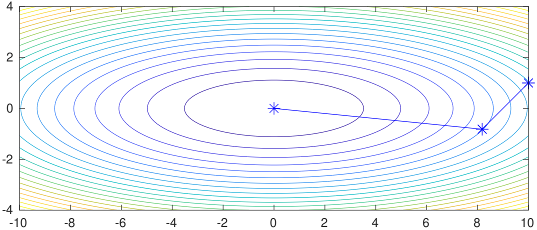
Példa

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad x_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$



Gradiens vs konjugált gradiens





$$A = \begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_0 = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Konjugált gradiens módszer lineáris esetben

Első verzió

Adott x_0 esetén legyen $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$, $k = 0$.
while $r_k \neq 0$

$\alpha_k = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k}$

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

$r_{k+1} = Ax_{k+1} - b$

$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T A p_k}{p_k^T A p_k}$

$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

$k = k + 1$

end

Tétel.

Az előbb definiált sorozat legfeljebb n lépésben eléri x^*-ot.

Konjugált gradiens módszer lineáris esetben

Javított verzió

Adott x_0 esetén legyen $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$, $k = 0$.
while $r_k \neq 0$

$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$

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

$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$

$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

$k = k + 1$

end

Megjegyzés. Műveletigény: minden lépésben egy mátrix-vektor szorzást és két belsőszorzat kiszámítását kell elvégezni.
Az iteráció során az A nem változik (nincs feltöltődés).
$\rightarrow$ jól használható nagyméretű **ritka mátrixok** esetén

Ritka mátrixok

- Ritka mátrix: elemeinek jelentős hányada 0
- Csak a nemnulla elemeket tárolva és azokkal számolva jelentősen csökkenthető a tár-, és műveletigény.
- A nemnulla elemek elhelyezkedése lehet jól strukturált (pl. tridiagonális mátrix), de nem feltétlenül az

Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és jelölje nnz a nemnulla elemek számát.

Ritka mátrixok tárolására sok mód ismert, a leggyakoribbak:

Ritka mátrixok, koordinátánkénti tárolás

Minden $a_{ij} \neq 0$ elem esetén a (i, j, a_{ij}) számhármast tároljuk.

3 tömb: `sor`, `oszlop`, `ertek`, mindhárom *nnz* elemű.

Jellemzői:

- könnyen áttekinthető
- könnyen hozzávehető egy újabb nemnulla elem
- a nemnulla elemek sorrendje tetszőleges
- sor- és oszlopindex szerint is könnyen kereshetőek az elemek
- tárigény: $2nnz$ egész és *nnz* lebegőpontos szám
- a mátrix-vektor szorzás egyszerűen végezhető

Ritka mátrixok, koordinátánkénti tárolás

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & -2.1 & 0 \\ 0 & 0.1 & 3.2 & 0 & 0 \\ 0 & -1.7 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 3.1 & 0 & 0 & 0 & 1.4 \end{pmatrix}$$

`ertek`	0.5	−2.1	0.1	3.2	−1.7	3	−1	3.1	1.4
`sor`	1	1	2	2	3	3	4	5	5
`oszlop`	1	4	2	3	2	3	4	1	5

Mátrix-vektor szorzás

Legyen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ egy ritka mátrix, $x \in \mathbb{R}^n$ egy telt vektor. $y = Ax$ számítása:

```
for k=1:n
  y(sor(k))=y(sor(k))+ertek(k)*x(oszlop(k));
end
```

Ritka mátrixok, Compressed Row Storage

3 tömb: `ertek` (nnz elemű), `oszlop` (nnz elemű), `sor` ($n+1$ elemű)

`ertek`: a nemnulla elemek, sorfolytonosan
`oszlop`: a nemnulla elemek oszlopindexei
`sor`: az első n eleme megmutatja, hogy az `ertek` tömb mely elemeinél kezdődik új sor, az utolsó eleme $nnz+1$

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & -2.1 & 0 \\ 0 & 0.1 & 3.2 & 0 & 0 \\ 0 & -1.7 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 3.1 & 0 & 0 & 0 & 1.4 \end{pmatrix}$$

`ertek`	0.5	−2.1	0.1	3.2	−1.7	3	−1	3.1	1.4
`oszlop`	1	4	2	3	2	3	4	1	5

`sor`	1	3	5	7	8	10

Ritka mátrixok, Compressed Row Storage

Jellemzői:

- a sorok szerinti elérés egyszerű, az oszlopok szerinti bonyolult
- az elemek sorrendje nem tetszőleges
- tárigény: nnz lebegőpontos szám, $nnz + n + 1$ egész
- a mátrix-vektor szorzás egyszerű

Mátrix-vektor szorzás

Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ egy ritka mátrix, $x \in \mathbb{R}^n$ egy telt vektor. $y = Ax$ számítása:

```
for i=1:n
   y(i)=0;
   for k=sor(i):sor(i+1)-1
     y(i)=y(i)+ertek(k)*x(oszlop(k));
   end
end
```

Compressed Column Storage (Harwell-Boeing formátum)

3 tömb: `ertek` (nnz elemű), `sor` (nnz elemű), `oszlop` ($n+1$ elemű)

`ertek`: a nemnulla elemek, oszlopfolytonosan
`sor`: a nemnulla elemek sorindexei
`oszlop`: az első n eleme megmutatja, hogy az `ertek` tömb mely elemeinél kezdődik új oszlop, az utolsó eleme $nnz+1$

Az A mátrix CCS formátuma nem más, mint az A^T mátrix CRS formátuma.

Ritka mátrixok, Compressed Column Storage

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & -2.1 & 0 \\ 0 & 0.1 & 3.2 & 0 & 0 \\ 0 & -1.7 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 3.1 & 0 & 0 & 0 & 1.4 \end{pmatrix}$$

`ertek`	0.5	3.1	0.1	−1.7	3.2	3	−2.1	−1	1.4
`sor`	1	5	2	3	2	3	1	4	5

`oszlop`	1	3	5	7	9	10

Ritka mátrixok, Compressed Column Storage

Mátrix-vektor szorzás

Legyen $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ egy ritka mátrix, $x \in \mathbb{R}^n$ egy telt vektor. $y = x^T \cdot A$ számítása:

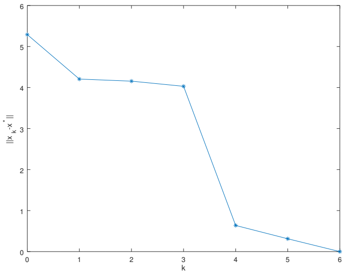
```
for j=1:n
   y(j)=0;
   for k=oszlop(j):oszlop(j+1)-1
     y(j)=y(j)+ertek(k)*x(sor(k));
   end
end
```

Konjugált gradiens módszer, lineáris eset

Tétel.

Ha A-nak r különböző sajátértéke van, akkor a módszer legfeljebb r lépésben megtalálja x^*-ot.
Ha $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$, akkor

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



Konjugált gradiens módszer, lineáris eset

Prekondícionálás.

Legyen C egy reguláris mátrix. Az $\widehat{x} = Cx$ transzformációt alkalmazva a megoldandó egyenletrendszer

$$(C^{-T}AC^{-1})\widehat{x} = C^{-T}b,$$

a minimalizálandó függvény

$$\frac{1}{2}\widehat{x}^T(C^{-T}AC^{-1})\widehat{x} - (C^{-T}b)\widehat{x}$$

alakú lesz.

Ha a $(C^{-T}AC^{-1})$ mátrix sajátértékeinek eloszlása jobb, akkor a konvergencia gyorsabb lesz.

Konjugált gradiens módszer, lineáris eset

Valójában az algoritmusban nem a C, hanem a $C^TC =: M$ mátrixra van szükség

Adott x_0 és M. Legyen $r_0 = Ax_0 - b$.
Oldjuk meg az $My_0 = r_0$ lin.egy.rendszert.
Legyenek $p_0 = -y_0$, $k = 0$.
while $r_k \neq 0$

$\alpha_k = \frac{r_k^T y_k}{p_k^T A p_k}$

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

$r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$

Oldjuk meg az $My_{k+1} = r_{k+1}$ lin.egy.rendszert

$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T y_{k+1}}{r_k^T y_k}$

$p_{k+1} = -y_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

$k = k + 1$

end

Konjugált gradiens módszer, lineáris eset

A prekondícionáló mátrix megválasztása
Ha pl A nagyméretű ritka mátrix, akkor egy lehetséges megoldás:

Legyen $\widetilde{L}\widetilde{L}^T$ az A mátrix nem teljes Cholesky felbontása (ekkor $A \approx \widetilde{L}\widetilde{L}^T$), és legyen

$$M = \widetilde{L}\widetilde{L}^T.$$

Ekkor

$$C^{-T}AC^{-1} = \widetilde{L}^{-1}A\widetilde{L}^{-T} \approx I,$$

amely mátrixnak kedvező a sajátértékeloszlása.

Példa.

Matlab-bal generálva:

- A: egy 25×25-ös szimmetrikus, pozitív definit véletlen mátrix, melynek sajátértékei $1, \ldots, 25$ (ld. a beépített `sprandsym` függvényt),
- $x \in \mathbb{R}^{25}$ azonosan 1 oszlopvektor
- $b = Ax$ vektor,

a beépített `pcg` függvénnyel (A-ra és b-re), az elvégzett lépések száma általában 20.

Ugyanez prekondicionálás után (az `ichol` függvényel elkészítve a nem teljes Cholesky-felbontás L mátrixát, illetve a prekondicionáló $M = LL^T$ mátrixot):

az elvégzett lépések száma 4.

Konjugált gradiens módszer, nemlineáris eset

	Lineáris eset	Nemlineáris eset
célfv	konvex kvadratikus	tetsz. nemlineáris
α_k	egzakt min.	közelítő min.
r_k	$Ax_k - b \ (= \nabla\Phi)$	∇f_k

Fletcher-Reeves algoritmus

Adott x_0 esetén legyen $p_0 = -\nabla f_0$, $k = 0$.

while $\nabla f_k \neq 0$

α_k meghatározása

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

∇f_{k+1} kiszámítása

$\beta_{k+1} = \frac{\nabla f_{k+1}^T \nabla f_{k+1}}{\nabla f_k^T \nabla f_k}$

$p_{k+1} = -\nabla f_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$

$k = k + 1$

end

Fletcher-Reeves algoritmus

α meghatározása

α_k-t úgy választjuk, hogy p_{k+1} csökkenési irány legyen:

- α_k vagy az egzakt minimumhely,
- ha α_k nem egzakt minimumhely, akkor teljesítse az erős Wolfe-feltételeket:

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha_k \nabla f_k^T p_k$$

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k| \leq -c_2 \nabla f_k^T p_k$$

valamely $0 < c_1 < c_2 < \frac{1}{2}$ esetén.

Megjegyzés. Az első feltétel a következő alakba írható

$$\Phi(\alpha_k) \leq \Phi(0) + c_1 \alpha_k \Phi'(0)$$

ahol $\Phi(\alpha_k) = f(x_k + \alpha_k p_k)$.

α_k meghatározása, interpolációs módszer

Legyen adott a_0 (α_k kezdeti közelítése). Ha

$$\Phi(a_0) \leq \Phi(0) + c_1 a_0 \Phi'(0)$$

akkor $\alpha_k = a_0$. Egyébként meghatározzuk a $\Phi(0)$, $\Phi'(0)$, $\Phi(a_0)$ értékekre illeszkedő másodfokú polinomot, és megkeressük a minimumhelyét (a_1).

Ha

$$\Phi(a_1) \leq \Phi(0) + c_1 a_1 \Phi'(0)$$

akkor $\alpha_k = a_1$. Egyébként meghatározzuk a $\Phi(0)$, $\Phi'(0)$, $\Phi(a_0)$, $\Phi(a_1)$ értékekre illeszkedő harmadfokú polinomot, és megkeressük a minimumhelyét (a_2). Ekkor $0 < a_2 < a_1$. Ha

$$\Phi(a_2) \leq \Phi(0) + c_1 a_2 \Phi'(0)$$

akkor $\alpha_k = a_2$, egyébként meghatározzuk a $\Phi(0)$, $\Phi'(0)$ értékekre és az utolsó két a_i-hez tartozó függvényértékre illeszkedő harmadfokú polinomot, stb.

Konjugált gradiens módszer, nemlineáris eset

Az algoritmus újraindítása

Minden elvégzett n lépés után javasolt újraindítani az iterációt $\beta_k = 0$-val.

Ekkor

$$\|x_{k+n} - x^*\| = O(\|x_k - x^*\|^2)$$

azaz a konvergecia "n-lépéses négyzetes".

Ha f az x^* egy környezetében kvadratikus, és az iteráció konvergens, akkor elegendően nagy k-ra az iteráció belép ebbe a régióba. Ekkor az újraindítás a lineáris konjugált gradiens módszer használatát jelenti (ami legfeljebb n lépés után megáll).

Nagyméretű feladatok

- akár több ezer változó
- tárolási problémák
- nagy műveletigény

Nagyméretű feladatok

Nem egzakt Newton-módszerek

Emlékeztető: Newton-módszer esetén a keresési irány meghatározása:

$$\nabla^2 f_k p_k = -\nabla f_k$$

Ha Cholesky-felbontással oldjuk meg, akkor az esetlegesen ritka Hesse-mátrix feltöltődhet.

Konjugált gradiens módszer?

A maradékvektor: $r_k = \nabla^2 f_k p_k + \nabla f_k$

A keresést akkor fogjuk leállítani, ha

$$\|r_k\| \leq \eta_k \|\nabla f_k\|,$$

ahol $0 < \eta_k < 1$.

Nem egzakt Newton-módszerek

1. Tétel

Tfh az x^* minimumhely egy környezetében a Hesse-mátrix létezik és folytonos, továbbá $\nabla^2 f_* > 0$. Ha az $x_{k+1} = x_k + p_k$ iteráció esetén p_k-t úgy választottuk, hogy

$$\|r_k\| \leq \eta_k \|\nabla f_k\|,$$

ahol $0 < \eta_k \leq \eta < 1$, és x_0 elegendően közel volt x^*-hoz, akkor $x_k \to x^*$.

2. Tétel

Az előző feltételek mellett a konvergencia szuperlineáris, ha $\eta_k \to 0$. Ha ráadásul ∇f Lipschitz-folytonos x^* egy környezetében, és $\eta_k = O(\|\nabla f_k\|)$, akkor a konvergencia kvadratikus.

Megjegyzés.

- $\eta_k = \min(0.5, \sqrt{\|\nabla f_k\|}) \to$ szuperlináris konvergencia
- $\eta_k = \min(0.5, \|\nabla f_k\|) \to$ kvadratikus konvergencia

Nem egzakt Newton-módszerek

Newton-módszer vonalmenti kereséssel + konjugált gradiens

A keresési irány meghatározásához a

$$\nabla^2 f_k p_k = -\nabla f_k$$

egyenletre alkalmazzuk a konjugált gradiens módszert, az előző leállási feltétellel.
Ha kiderül, hogy $\nabla^2 f_k$ nem pozitív definit, vagy az irány nem csökkenési irány, akkor leállítjuk a konjugált gradiens algoritmust, a keresési irány a negatív gradiens lesz.

Előnye: jól alkalmazható nagy rendszerekre

Hátránya: ha a Hesse közel szinguláris, akkor a vonalmenti keresés nagyon lelassul

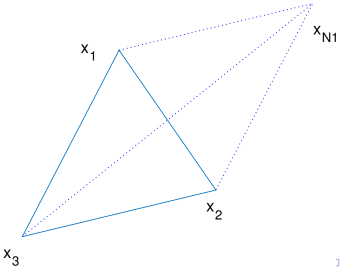
Deriváltmentes módszerek

Nelder-Mead algoritmus

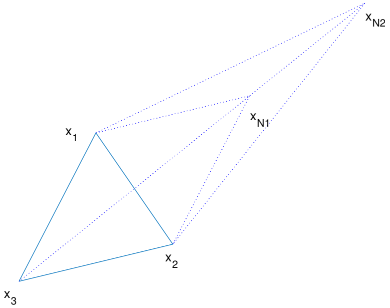
Az alapötlet $\mathbb{R}^2$-ben:
Tekintsünk egy x_1, x_2 és x_3 csúcsú kiinduló háromszöget, és tfh

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq f(x_3)$$

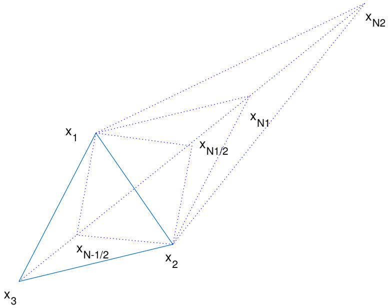
Töröljük a legrosszabb pontot (x_3) és vegyünk helyette egy új pontot a következő algoritmus szerint:
Tükrözzük x_3-at az $[x_1, x_2]$ szakasz középpontjára. legyen a kapott pont x_{N1}



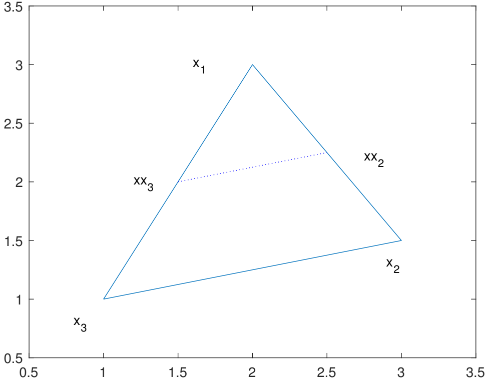
- Ha $f(x_1) \leq f(x_{N1}) < f(x_2)$, akkor legyen $x_3 = x_{N1}$. (**tükrözés**) (Az új pont nem a legrosszabb, de nem is jobb, mint az előző legjobb)
- Ha $f(x_{N1}) < f(x_1)$ (az új pont jobb, mint az előző legjobb) akkor vegyük x_{N2}-t és
  - ha $f(x_{N2}) < f(x_{N1})$ akkor legyen $x_3 = x_{N2}$ (**nyújtás**)
  - egyébként legyen $x_3 = x_{N1}$.



- Ha $f(x_{N1}) \geq f(x_2)$ (az új pont a legrosszabb)
  - ha $f(x_2) \leq f(x_{N1}) < f(x_3)$ akkor vegyük $x_{N1/2}$-t (**kontrakció kifelé**) és ha $f(x_{N1/2}) \leq f(x_{N1})$ akkor $x_3 = x_{N1/2}$.
  - egyébként vegyük $x_{N-1/2}$-t (**kontrakció befelé**) és ha $f(x_{N-1/2}) \leq f(x_3)$ akkor $x_3 = x_{N-1/2}$.
  - ha egyik kontrakció sem működik, akkor kicsinyítsük le a háromszöget a legjobb pont irányába (x_1).



Kicsinyítés



Legkisebb négyzetes feladatok

$t_1, t_2, \dots, t_m$ (időpillanatok)
$y_1, y_2, \dots, y_m$ (megfigyelések)

$F(t, x)$: adott modell az $x \in \mathbb{R}^n$ ismeretlen paramétervektorral.

Azt a paramétervektort keressük, melyre

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} (F(t_i, x) - y_i)^2.$$

minimális. Tipikusan $n \ll m$.

Általános alak:
Keressük a

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i^2(x)$$

minimumhelyét, ahol $r_i(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.

Legkisebb négyzetes feladatok

Az $r(x) = (r_1(x), \ldots, r_m(x))^T$ jelölésekkel (ekkor $r : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$)

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} r_i^2(x) = \frac{1}{2} \| r(x) \|_2^2.$$

Lineáris legkisebb négyzetes feladat: $r(x) = Ax - b$ valamely $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ esetén. (Az F modell az x lineáris függvénye)

Nemlineáris legkisebb négyzetes feladat: $r(x)$ egy tetszőleges nemlineáris függvénye x-nek. (Az F modell nemlineáris függvénye x-nek)

Lineáris legkisebb négyzetek

A modell:

$$F(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t),$$

ahol $x_1, \ldots, x_n$ ismeretlen paraméterek, $\varphi_1(t), \ldots, \varphi_n(t)$ adott függvények.

Példa.

1. $n = 3$ és $\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = \sin(\pi t)$, $\varphi_3(t) = \cos(\pi t)$:

$$F(t) = x_1 + x_2 \sin(\pi t) + x_3 \cos(\pi t)$$

2. $\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = t$, ..., $\varphi_n(t) = t^{n-1}$:

$$F(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \cdots + x_n t^{n-1}$$

Lineáris legkisebb négyzetek

Legyen

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & & & \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \dots & \varphi_n(t_m) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m, \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n,$$

Ekkor

$$Ax = \begin{pmatrix} F(t_1) \\ F(t_2) \\ \vdots \\ F(t_m) \end{pmatrix}$$

Lineáris legkisebb négyzetek

A célfüggvény:

$$f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(F(t_i) - y_i)^2 = \frac{1}{2}\|Ax - y\|_2^2$$

(Most $r_i(x) = F(t_i) - y_i$ és $r_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.)

Ha x^* az f minimumhelye, akkor $\nabla f(x^*) = 0$, azaz x^* az alábbi rendszer megoldása

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{n} x_j\varphi_j(t_i) - y_i\right)\varphi_k(t_i) = 0$$

$k = 1, \dots, n$

Lineáris legkisebb négyzetek

Egy lineáris egyenletrendszerhez jutunk:

$$\sum_{j=1}^{n} x_j \underbrace{\sum_{i=1}^{m} \varphi_j(t_i)\varphi_k(t_i)}_{(A^TA)_{kj}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{m} y_i\varphi_k(t_i)}_{(A^Ty)_k}$$

$$\underbrace{\sum_{j=1}^{n}(A^TA)_{kj}x_j}_{(A^TAx)_k} = (A^Ty)_k$$

Mátrixos alakban:

$$A^TAx = A^Ty$$

Gauss-féle normálegyenlet

Lineáris legkisebb négyzetek

$$A^T Ax = A^T y$$

- A normálegyenlet mindig megoldható.
- A megoldás f minimumhelye lesz.
- Ha az A oszlopvektorai lineárisan függetlenek, akkor a megoldás egyértelmű.
- Ha az A oszlopvektorai lineárisan függőek ($A^T A$ szinguláris), akkor végtelen sok megoldás van.

Szinguláris esetben

- végezzünk több mérést (növeljük m-et)
- egyszerűsítsük a modellt (csökkentsük n-et)

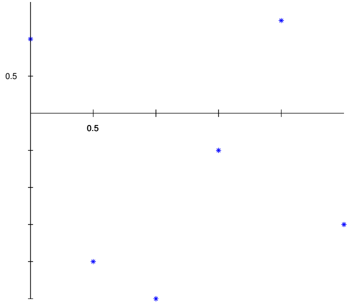
1. Példa.

Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő

$$F(t) = x_1 + x_2 \cos(\pi t) + x_3 \sin(\pi t)$$

alakú modellt!

t_i	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{2}$
f_i	1	-2	$-\frac{5}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{5}{4}$	$-\frac{3}{2}$



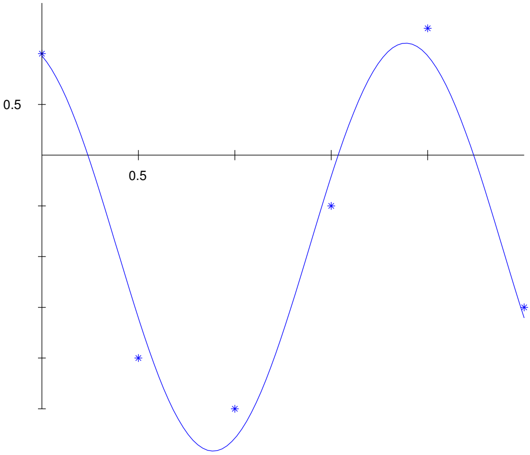
$\varphi_1(t) \equiv 1$, $\varphi_2(t) = \cos(\pi t)$, $\varphi_3(t) = \sin(\pi t)$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \cos(\pi t_1) & \sin(\pi t_1) \\ 1 & \cos(\pi t_2) & \sin(\pi t_2) \\ \vdots & & \\ 1 & \cos(\pi t_6) & \sin(\pi t_6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 6 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \qquad A^T f = \begin{pmatrix} -\frac{17}{4} \\ \frac{19}{4} \\ -3 \end{pmatrix}$$

Az $A^T A x = A^T f$ Gauss-féle normálegyenlet megoldása:

$$x = \begin{pmatrix} -\frac{29}{32} \\ \frac{181}{96} \\ -\frac{67}{96} \end{pmatrix}$$


0.5
0.5

2. Példa.

Határozzuk meg az alábbi adatokat négyzetesen legjobban közelítő

$$F(t) = x_1 + x_2 \cos(\pi t) + x_3 \sin(\pi t)$$

alakú modellt!

t_i	0	$\frac{1}{2}$	2	$\frac{5}{2}$
f_i	1	-2	$\frac{5}{4}$	$-\frac{3}{2}$

Az előző példából:

t_i	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{2}$
y_i	1	-2	$-\frac{5}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{5}{4}$	$-\frac{3}{2}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \to A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ -\frac{5}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{5}{4} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \to y = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ \frac{5}{4} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

Az A oszlopai lineárisan függőek $\to$ $A^T A$ szinguláris

A szingularitás kezelése:

1. több adat felvétele (ld. előző példa)
2. a modell egyszerűsítése:

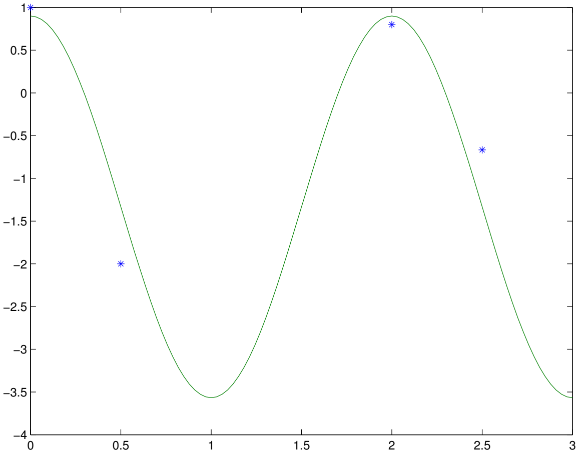
$$F(t) = x_1 + x_2 \cos(\pi t)$$

Ekkor

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad f = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ \frac{5}{4} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

Az $A^T A x = A^T f$ Gauss-féle normálegyenlet megoldása:

$$x = \begin{pmatrix} -1.3333 \\ 2.2333 \end{pmatrix}$$


1
0.5
0
−0.5
−1
−1.5
−2
−2.5
−3
−3.5
−4
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3

Lineáris legkisebb négyzetek

Megoldási technikák az $A^TAx = A^Ty$ normálegyenlet esetén.

(1) A^TA szimmetrikus

(2) A^TA pozitív definit, ha A teljes rangú, egyébként pozitív szemidefinit

Megoldási módszerek:

- Cholesky-felbontás,
  ha A teljes rangú.
  Hátránya: $cond(A^TA) = (cond(A))^2$
- QR-felbontás
  Legyen
  $$AP = Q\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = (Q_1, Q_2)\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = Q_1R,$$
  ekkor
  $$\|Ax - y\|_2^2 = \|RP^Tx - Q_1^Ty\|_2^2 + \|Q_2^Ty\|_2^2,$$
  így $x^* = PR^{-1}Q_1^Ty$.

Lineáris legkisebb négyzetek

- SVD felbontás

$$A = U \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix} V^T = (U_1, U_2) \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix} V^T = U_1 S V^T$$

$$\|Ax - y\|_2^2 = \|SV^T x - U_1^T y\|_2^2 + \|U_2^T y\|_2^2$$

Ekkor

$$x^* = VS^{-1} U_1^T y = \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^T y}{\sigma_i} v_i.$$

Ha σ_i kicsi, akkor x^* érzékeny az y és az A perturbációjára.

Költséges, de érzékenységvizsgálatra használható.

Pszeudoinverz

Legyen $A = USV^T$ az $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mátrix szinguláris felbontása. Ekkor az az A (Moore-Penrose féle) pszeudoinverze:

$$A^+ = VS^+U^T,$$

ahol $S^+ \in \mathbb{R}^{n \times m}$ egy diagonális mátrix,

$$s_{ii}^+ = \frac{1}{\sigma_i}, \quad i = 1, \ldots, rang(A)$$

(σ_i az A i-edik szinguláris értéke).

- A pszeudoinverz minden mátrix esetén egyértelműen létezik.
- Ha A invertálható, akkor $A^+ = A^{-1}$.
- Ha az A oszlopai lineárisan függetlenek, akkor $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$.

Tekintsük az $Ax = b$ lineáris egyenletrenszert. Keressük ennek a megoldását általános értelemben, azaz oldjuk meg az

$$\|Ax - b\|_2 \to \min$$

feladatot. Ennek megoldását az

$$x^* = A^+ b$$

vektor adja:

- Ha az $Ax = b$ rendszer egyértelműen megoldható, akkor x^* ezt adja.
- Ha több megoldása létezik az $Ax = b$ rendszernek, akkor a fenti képlet a legkisebb euklideszi normájút adja.
- Ha az $Ax = b$ rendszer nem oldható meg, akkor x^* a legkisebb négyzetes értelemben vett megoldást adja, amennyiben az nem egyértelműen létezik, akkor a legkisebb euklideszi normájút.

Lineáris legkisebb négyzetek, példa

Szabályos időlépésenként megfigyelünk egy $y(t)$ jelet, de átviteli probléma miatt néhány időpillanatban hiányzik a megfigyelés. Próbáljuk meg rekonstruálni a jelet!

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y_1 \\ \color{red}{y_2} \\ \color{red}{y_3} \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y_1 \\ \color{red}{0} \\ \color{red}{0} \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} y_1 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x$$

$$Sy = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = x$$

Ha y a teljes n pontos jel, x pedig a megfigyelt k pontos jel, akkor

$$x = Sy,$$

ahol a $k \times n$-es mintavételezési S mátrix az $n \times n$-es egységmátrix alkalmas sorainak elhagyásával kapható.

A kimaradó $(n-k)$ pontos jel:

$$S_m y = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = z$$

Ekkor

$$S^T x + S_m^T z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} y_1 \\ 0 \\ 0 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ y_2 \\ y_3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} = y$$

z-t keressük, úgy, hogy az y jel „elég sima" legyen.

Legyen D a másodrendű differencia mátrix:

$$D = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix},$$

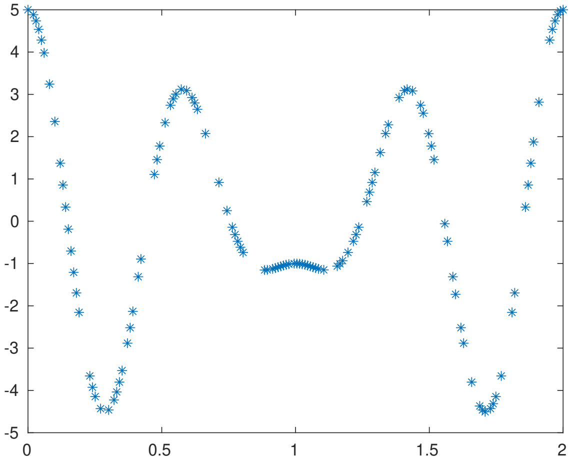
ekkor a

$$J(z) := \|Dy\|_2^2 = \|D(S^T x + S_m^T z)\|_2^2 = \|DS^T x + DS_m^T z\|_2^2$$

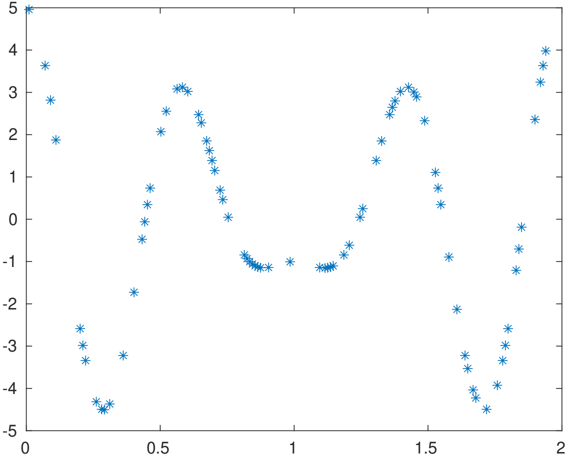
függvény minimumát keressük. A megoldást a

$$S_m D^T D S_m z = -S_m D^T D S^T x$$

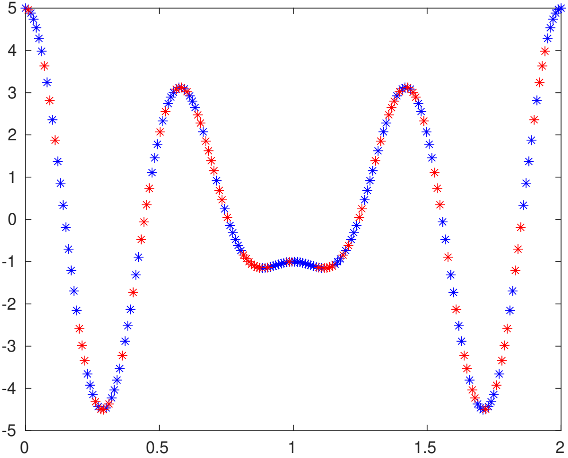
normálegyenlet adja.



Egy eredetileg 201 pontos jelből 80 megfigyelés hiányzik.



A normálegyenlet megoldása után a 80 pontos jel.



A megfigyelt jel (kék) kiegészítve az előbb meghatározott 80 pontos jellel (piros).

Lineáris legkisebb négyzetek, példa

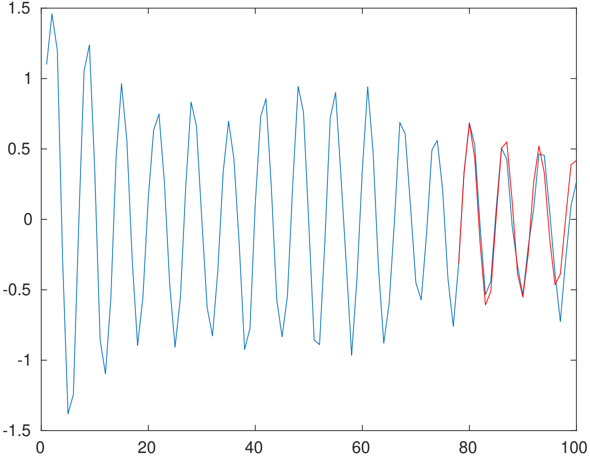
Megfigyelünk egy $y(n)$ folyamatot, mely egy háromlépéses autoregresszív folyamat, azaz

$$y(n) = \alpha_1 y(n-1) + \alpha_2 y(n-2) + \alpha_3 y(n-3) + \varepsilon(n), \quad n = 4, 5, \dots$$

ahol $\varepsilon(n)$ egy véletlen zaj. A megfigyelések alapján becsüljük meg az $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ paramétereket.

$$\begin{pmatrix} y(4) \\ y(5) \\ \vdots \\ y(N) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} y(3) & y(2) & y(1) \\ y(4) & y(3) & y(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ y(N-1) & y(N-2) & y(N-3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

$\Longrightarrow$ legkisebb négyzetes közelítés



Egy folyamat 100 lépése (kék), illetve az első 80 tagból megbecsülve az $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ együtthatókat, az utolsó 20 lépésre kapott becslés (piros).

Nemlineáris legkisebb négyzetek

Gauss-Newton módszer

Példa.

t_i	15	46	74	105	135	166	196	227	258	288	319	349
y_i	-1.7	0.1	5.2	10.3	15.8	18.9	21.1	20.3	16.1	10.2	4.2	0.5

A modell:

$$F(t) = x_1 + x_2 \cdot \cos\left(2\pi \frac{t - x_3}{365}\right)$$

Ekkor

$$r(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \cdot \cos\left(2\pi \frac{t_1 - x_3}{365}\right) \\ x_1 + x_2 \cdot \cos\left(2\pi \frac{t_2 - x_3}{365}\right) \\ \vdots \\ x_1 + x_2 \cdot \cos\left(2\pi \frac{t_{12} - x_3}{365}\right) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{12} \end{pmatrix},$$

és $r : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^{12}$ nemlineáris függvénye x-nek.

Nemlineáris legkisebb négyzetek

$$f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} r_i^2(x),$$

így

$$\nabla f(x) = \sum_{i=1}^{m} r_i(x)\nabla r_i(x) = J(x)^T r(x)$$

és

$$\nabla^2 f(x) = \underbrace{\sum_{i=1}^{m} \nabla r_i(x)\nabla r_i(x)^T}_{J(x)^T J(x)} + \sum_{i=1}^{m} r_i(x)\nabla^2 r_i(x),$$

ahol J az r Jacobi mátrixa.

Nemlineáris legkisebb négyzetek

Ha f-et Newton-módszerrel minimalizáljuk:

$$\nabla^2 f_k p = -\nabla f_k$$

Felhasználva, hogy $\nabla f(x) = J(x)^T r(x)$ és $\nabla^2 f(x) \approx J(x)^T J(x)$ kapjuk, hogy

$$J_k^T J_k p = -J_k^T r_k$$

Ha J_k teljes rangú és $\nabla f_k \neq 0$ akkor p csökkenési irány $\to$ vonalmenti keresés.

A Gauss-Newton módszer egy másik származtatása:
$r(x_k + p) \approx r(x_k) + J_k p$, így

$$f(x_k + p) = \frac{1}{2}\|r(x_k + p)\|^2 \approx \frac{1}{2}\|r(x_k) + J_k p\|^2$$

Levenberg-Marquardt módszer

Egy megbízhatósági tartomány alapú módszer a legkisebb négyzetes feladat megoldására.

Felhasználva, hogy $r(x_k + p) \approx J_k p + r_k$ (vagy $\nabla^2 f_k \approx J_k^T J_k$) a

$$\min_p \frac{1}{2}\|J_k p + r_k\|^2, \qquad \text{ahol } \|p\| \leq \Delta_k$$

problémát oldjuk meg.
A modellfüggvény:

$$m_k(p) = \frac{1}{2} p^T J_k^T J_k p + p^T J_k^T r_k + \frac{1}{2}\|r_k\|^2$$

Legyen p_k^{LM} a minimumfeladat megoldása.

Levenberg-Marquardt módszer

Ha p_k^{GN} a

$$J_k^T J_k p_k = -J_k^T r_k$$

feladat olyan megoldása, melyre $\|p_k^{GN}\| \leq \Delta_k$, akkor $p_k^{LM} = p_k^{GN}$.
Egyébként létezik olyan $\lambda > 0$, hogy $\|p_k^{LM}\| = \Delta_k$ és

$$(J_k^T J_k + \lambda I)p_k^{LM} = -J_k^T r_k.$$

Megjegyzés. A $(J^T J + \lambda I)p = -J^T r$ egyenlet a

$$\min_p \frac{1}{2} \left\| \begin{pmatrix} J \\ \sqrt{\lambda} I \end{pmatrix} p + \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix} \right\|^2$$

legkisebb négyzetes feladatra vonatkozó normálegyenlet.

Levenberg-Marquardt módszer

Tétel

A p^{LM} vektor pontosan akkor lesz a

$$\min_p \|Jp + r\|^2, \qquad \text{ahol } \|p\| \leq \Delta$$

feladat megoldása, ha p^{LM} megengedett, és létezik olyan $\lambda \geq 0$ hogy

$$(J^T J + \lambda I)p^{LM} = -J^T r,$$
$$\lambda(\Delta - \|p^{LM}\|) = 0.$$

Levenberg-Marquardt módszer

I. Algoritmus

Adoot p_k, λ_k, számítsuk ki J_k és r_k értékét

- ha $J_k^T J_k + \lambda_k I$ nem pozitív definit, akkor $\lambda_k := 4\lambda_k$, ismételjük, amíg poz.def. mátrixot nem kapunk.
- oldjuk meg a $(J_k^T J_k + \lambda_k I)p = -J_k^T r_k$ egyenletet a $\|p_k\| \leq \Delta_k$ feltétel mellett.
- számítsuk ki
$$\varrho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p)}{m_k(0) - m_k(p)}$$
értékét.
ha $\varrho_k < 0.25$ akkor $\Delta_k = \|p_k\|/4$
ha $\varrho_k > 0.75$ és $\|p_k\| = \Delta_k$ akkor $\Delta_k = 2\Delta_k$
- ha $\varrho_k > 0$ akkor $x_k = x_k + p_k$
- $k = k + 1$

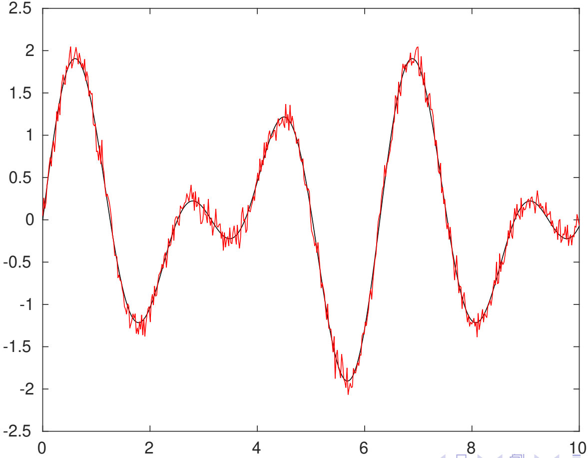
II. Algoritmus

Dogleg módszer

Legkisebb négyzetes módszerek alkalmazásai

Megfigyelünk egy $\varepsilon(t)$ ismeretlen zajjal terhelt $x(t)$ jelet:

$$y = x + \varepsilon$$



Egy olyan lassan változó jelet keresünk, mely közel van az y megfigyelt jelhez:

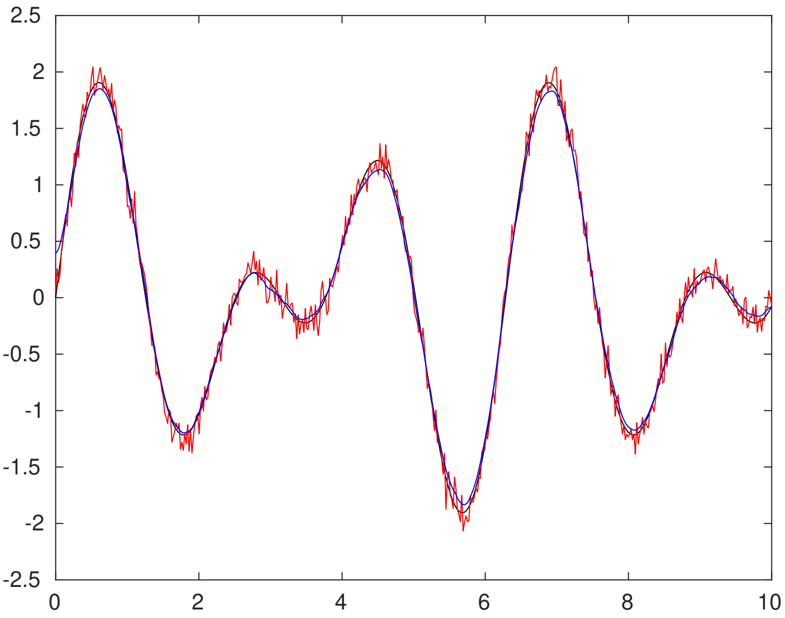
$$\min_x \left(\|x - y\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - x_{i-1})^2 \right),$$

ahol n a megfigyelések száma, λ egy paraméter.
Mátrixos alakban:

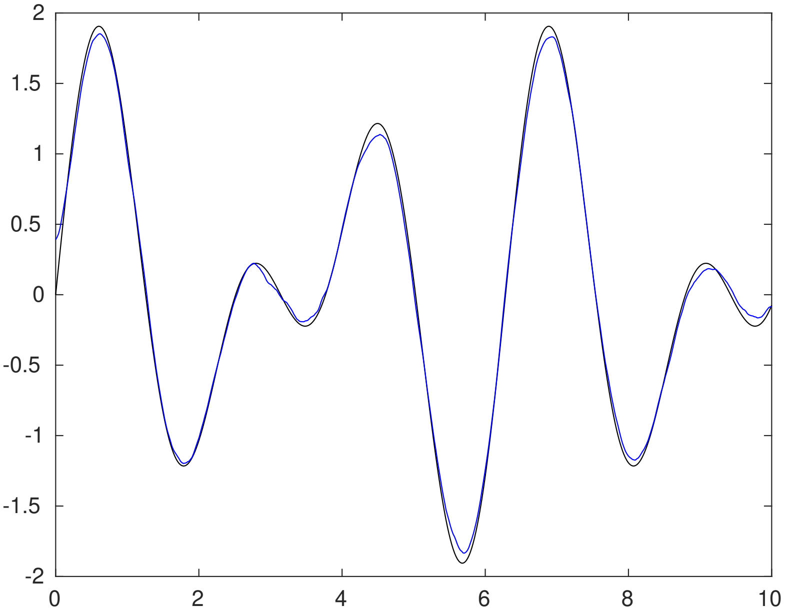
$$\min_x \left\| \begin{pmatrix} I \\ \sqrt{\lambda} D \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix} \right\|^2,$$

ahol

$$D = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times n}$$



A zajos és a simított jel



A simított jel

Legkisebb négyzetes módszerek alkalmazásai

Image deblurring

Legyen

X az eredeti kép
A torzítási mátrix (PSF)
B a torzított kép
$x = X(:)$
$b = B(:)$

Az x egy közelítését keressük, amikor

$$b = Ax + e,$$

ahol b és A ismertek, de az e ismeretlen zaj.

A naïve megoldás: $x = A^{-1}b$.

Ha $A = USV^T$ (szinguláris felbontás), akkor

$$x = VS^{-1}U^T b = \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

kis σ_i értékekkel való osztás $\to$ nagy hibák

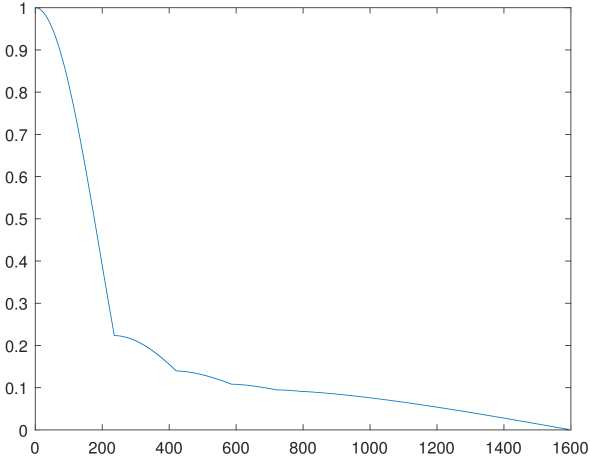
Filtering:

$$x = \sum_{i=1}^{n} \Phi_i \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i,$$

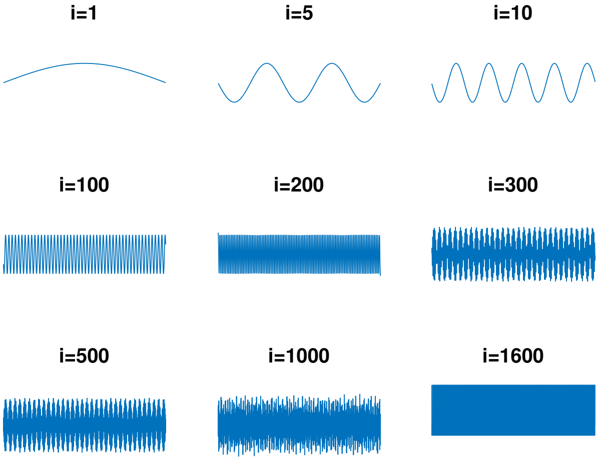
ahol

$$\Phi_i \approx \begin{cases} 1 & \text{nagy } \sigma_i\text{-re,} \\ 0 & \text{kicsi } \sigma_i\text{-re} \end{cases}$$

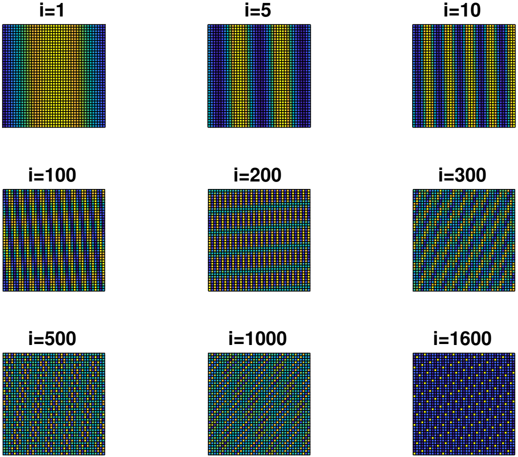
Egy $A \in \mathbb{R}^{1600\times 1600}$ mátrix szinguláris értékei, ahol az A a főátlójában és az 5-5 szomszédos mellékátlójában $\frac{1}{11}$-ek állnak, a többi eleme 0.



Az A szinguláris felbontásában szereplő V mátrix néhány oszlopvektora (a $V(:, i)$ vektor néhány i esetén).



`reshape(V(:,i),[40,40])` néhány *i* esetén



Csonkított SVD:

$$x = \sum_{i=1}^{k} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

ahol $k < n$.

Tikhonov regularizáció:

$$x = \sum_{i=1}^{n} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha^2} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i,$$

ami a

$$\min_x \left(\|Ax - b\|^2 + \alpha^2 \|x\|^2 \right)$$

feladat megoldása.

Az eredeti kép

Az eredeti kép megszorozva egy olyan A mátrixszal, melynek a főátlójában és az 5-5 szomszédos mellékátlójában $\frac{1}{11}$-ek állnak, a többi eleme 0.

Az előző kép + egy 0 várható értékű, 0.01 szórású normális eloszlásból származó zaj.

A naïve megoldás.

Egy megoldás Tikhonov-regularizációval.

Legkisebb négyzetek alkalmazása

Példa.

Egy műhold pályájára a következő adatokat mértük a (r, φ) polárkoordináta rendszerben

φ_i	48°	88°	150°	221°	247°	311°	359°
r_i	4.32	2.05	1.18	1.26	1.52	4.25	9.98

Kepler törvénye szerint

$$r = \frac{p}{1 - e \cdot \cos\varphi},$$

ahol p és e paraméterek. Becsüljük meg a paraméterek értékét.

1. megoldás, linearizáció.

Az $r = \frac{p}{1-e\cdot\cos\varphi}$ egyenlet helyett tekintsük az

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{p} - \frac{e}{p}\cos\varphi$$

egyenletet.
Keressük azt a

$$F(\varphi) = a + b\cdot\cos\varphi$$

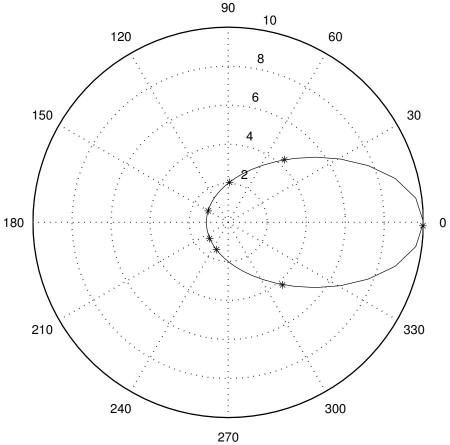
modellt, mely illeszkedik a $\left(\varphi_i, \dfrac{1}{r_i}\right)$ adatokra. (vagy a $\left(\cos\varphi_i, \dfrac{1}{r_i}\right)$ adatokra illeszkedő egyenest.)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \cos(44^\circ) \\ 1 & \cos(88^\circ) \\ 1 & \cos(150^\circ) \\ 1 & \cos(221^\circ) \\ 1 & \cos(247^\circ) \\ 1 & \cos(311^\circ) \\ 1 & \cos(359^\circ) \end{pmatrix}, \qquad y = \begin{pmatrix} 1/4.32 \\ 1/2.05 \\ 1/1.18 \\ 1/1.26 \\ 1/1.52 \\ 1/4.25 \\ 1/9.98 \end{pmatrix}, \qquad x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

ahol az $A^T Ax = A^T y$ normálegyenlet:

$$\begin{pmatrix} 7 & 0.3485 \\ 0.3485 & 3.3513 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.3538 \\ -1.1635 \end{pmatrix}.$$

A megoldás: $a = 0.4990$ és $b = -0.3991$. Felhasználva, hogy $a = 1/p$ és $b = e/p$ kapjuk, hogy $p = 2.0041$, $e = 0.7997$.


90
10
120
60
8
6
150
30
4
2
180
0
210
330
240
300
270

2. megoldás, nemlineáris legkisebb négyzetek

Legyen

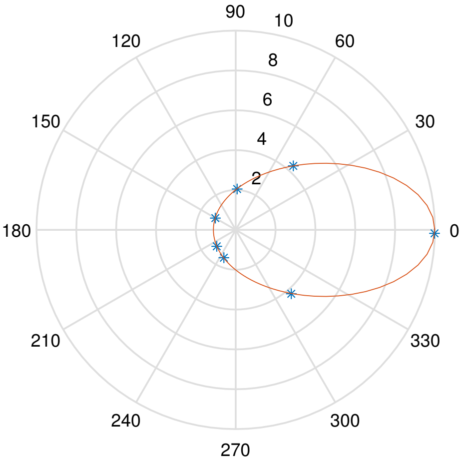
$$g(p,e) = \begin{pmatrix} \frac{p}{1-e\cdot\cos\varphi_1} - r_1 \\ \vdots \\ \frac{p}{1-e\cdot\cos\varphi_m} - r_m \end{pmatrix}$$

Keresett

$$\min_{(p,e)} \frac{1}{2}\|g(p,e)\|^2$$

Az `lsqnonlin` Matlab-függvény segítségével:

$$p = 2.0121 \quad e = 0.7986$$



90
10
120
60
8
6
150
30
4
2
180
0
210
330
240
300
270