

Κεφάλαιο 9

Κυρτή βελτιστοποίηση με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα μελετήσουμε προβλήματα της μορφής

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to} && \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \end{aligned} \tag{9.1}$$

με $f : \text{dom } f \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ κυρτή διπλά διαφορίσιμη συνάρτηση, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$, με $\text{rank}(\mathbf{A}) = p$, και $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$.

Υποθέτουμε ότι το πρόβλημα έχει λύση, έστω \mathbf{x}_* , και ορίζουμε $p_* := f(\mathbf{x}_*) = \inf \{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}\}$.

Γνωρίζουμε ότι το σημείο \mathbf{x}_* είναι βέλτιστο αν, και μόνο αν, ικανοποιούνται οι συνθήκες KKT, οι οποίες, στην περίπτωση αυτή, έχουν ως εξής:

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) + \mathbf{A}^T \mathbf{v}_* = \mathbf{0}, \quad \mathbf{Ax}_* = \mathbf{b}, \tag{9.2}$$

με $\mathbf{v}_* \in \mathbb{R}^p$.

Οι σχέσεις (9.2) αποτελούν σύστημα $(n + p)$, συνήθως, μη γραμμικών εξισώσεων.

Το γραμμικό σύστημα εξισώσεων $\mathbf{Ax}_* = \mathbf{b}$ καλείται σύστημα εξισώσεων **πρωτογενούς εφικτότητας** (primal feasibility).

Το σύστημα εξισώσεων $\nabla f(\mathbf{x}_*) + \mathbf{A}^T \mathbf{v}_* = \mathbf{0}$ καλείται σύστημα εξισώσεων **δυϊκής εφικτότητας** (dual feasibility), και είναι, γενικά, σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων.

Υπάρχουν διάφορες προσεγγίσεις για την επίλυση του προβλήματος (9.2). Αναφέρουμε τις εξής.

1. Μπορούμε να απαλείψουμε τους περιορισμούς ισότητας και κατόπιν να δουλέψουμε με προβλήματα χωρίς περιορισμούς, όπως στο προηγούμενο κεφάλαιο.
2. Αν η δυϊκή συνάρτηση είναι διαφορίσιμη, τότε μπορούμε να λύσουμε το δυϊκό πρόβλημα, το οποίο είναι πρόβλημα χωρίς περιορισμούς, και κατόπιν, με κάποιο τρόπο, να υπολογίσουμε την πρωτογενή βέλτιστη λύση.
3. Μπορούμε να επεκτείνουμε τη μέθοδο Newton από προβλήματα χωρίς περιορισμούς σε προβλήματα με περιορισμούς ισότητας. Αυτή θα είναι η βασική προσέγγιση την οποία θα ακολουθήσουμε.

9.1 Απαλοιφή περιορισμών ισότητων

(Δείτε στο B&V, σελίδες 523, 524).

9.2 Επίλυση πρωτογενούς προβλήματος μέσω του δυϊκού

Υποθέτουμε ότι ισχύει η ισχυρή δυϊκότητα.

Η δυϊκή συνάρτηση για το πρόβλημα (9.1) ορίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} g(\mathbf{v}) &= \inf_{\mathbf{x} \in \text{dom } f} \{f(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})\} \\ &= -\mathbf{b}^T \mathbf{v} + \inf_{\mathbf{x} \in \text{dom } f} \{f(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^T \mathbf{Ax}\}. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Αν η συνάρτηση g είναι διπλά διαφορίσιμη, τότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε κάποιο αλγόριθμο για τη λύση προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς και να λύσουμε το δυϊκό πρόβλημα

$$\text{maximize } g(\mathbf{v}). \quad (9.4)$$

Κατόπιν, η βέλτιστη δυϊκή μεταβλητή, \mathbf{v}_* , μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της βέλτιστης πρωτογενούς μεταβλητής, \mathbf{x}_* .

Παράδειγμα 9.2.1. (Αναλυτικό κέντρο με περιορισμούς ισότητας) Έστω το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \text{minimize } & f(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^n \log x_i \\ \text{subject to } & \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (9.5)$$

με $\mathbf{dom} f = \mathbb{R}_{++}^n$ και $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$ με $\mathbf{rank}(\mathbf{A}) = p$.

Η συνάρτηση Lagrange έχει ως εξής

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = - \sum_{i=1}^n \log x_i + \mathbf{v}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}). \quad (9.6)$$

Για δεδομένο \mathbf{v} , η $L(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ είναι κυρτή συνάρτηση του \mathbf{x} (να το αποδείξετε).

Η παράγωγος της L , ως προς \mathbf{x} , έχει ως εξής

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = - [x_1^{-1} \ \cdots \ x_n^{-1}]^T + \mathbf{A}^T \mathbf{v}. \quad (9.7)$$

Επιλύοντας την εξίσωση $\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$, λαμβάνουμε

$$x_i = \frac{1}{(\mathbf{A}^T \mathbf{v})_i}, \quad \text{για } i = 1, \dots, n. \quad (9.8)$$

Η δυϊκή συνάρτηση έχει ως εξής

$$g(\mathbf{v}) = \inf_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = L(1./(\mathbf{A}^T \mathbf{v}), \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^n \log (\mathbf{A}^T \mathbf{v})_i + n - \mathbf{b}^T \mathbf{v}. \quad (9.9)$$

Το δυϊκό πρόβλημα είναι το

$$\text{maximize } g(\mathbf{v}) = -\mathbf{b}^T \mathbf{v} + n + \sum_{i=1}^n \log (\mathbf{A}^T \mathbf{v})_i, \quad (9.10)$$

το οποίο είναι πρόβλημα με εννοούμενους περιορισμούς (implicit constraints) $\mathbf{A}^T \mathbf{v} > \mathbf{0}$.

Έστω ότι το δυϊκό πρόβλημα έχει λύση \mathbf{v}_* . Τότε, από την (9.8), λαμβάνουμε ότι

$$x_{*,i} = \frac{1}{(\mathbf{A}^T \mathbf{v}_*)_i}, \quad \text{για } i = 1, \dots, n. \quad (9.11)$$

Συνεπώς, αν λύσουμε το δυϊκό πρόβλημα, τότε μπορούμε πολύ εύκολα να λύσουμε το πρωτογενές πρόβλημα. \square

9.3 Κυρτά τετραγωνικά προβλήματα με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων

Πριν προχωρήσουμε στην επέκταση της μεθόδου Newton για την επίλυση προβλημάτων κυρτής βελτιστοποίησης με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων, θα μελετήσουμε ένα απλό, αλλά εξαιρετικά σημαντικό, πρόβλημα, το οποίο έχει αναλυτική λύση.

Η λύση του προβλήματος αυτού θα χρησιμοποιηθεί ως δομικός λίθος για την ανάπτυξη αλγορίθμων κυρτής βελτιστοποίησης, με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων.

Έστω το τετραγωνικό πρόβλημα με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x} + r \\ & \text{subject to} && \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (9.12)$$

με $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{P} \succeq \mathbf{O}$, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$, και $r \in \mathbb{R}$.

Οι συνθήκες KKT για το πρόβλημα αυτό έχουν ως εξής

$$\mathbf{P} \mathbf{x}_* + \mathbf{q} + \mathbf{A}^T \mathbf{v}_* = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A} \mathbf{x}_* = \mathbf{b}, \quad (9.13)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_* \\ \mathbf{v}_* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{q} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}, \quad (9.14)$$

δηλαδή, αποτελούν σύστημα $(n + p)$ γραμμικών εξισώσεων.

Αν ο πίνακας συντελεστών είναι αντιστρέψιμος, τότε υπάρχει μοναδική λύση για το (πρωτογενές – δυϊκό) βέλτιστο ζεύγος $(\mathbf{x}_*, \mathbf{v}_*)$.

Μπορεί να αποδειχθεί ότι, αν $\mathbf{P} \succ \mathbf{O}$, τότε ο πίνακας συντελεστών είναι αντιστρέψιμος. (Για πιο πολλές λεπτομέρειες δείτε στο B&V, σελίδες 522, 523).

9.4 Μέθοδος Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο

Σε αυτό το εδάφιο, επεκτείνουμε τη μέθοδο Newton από προβλήματα χωρίς περιορισμούς σε προβλήματα με αφφινικούς περιορισμούς ισοτήτων.

Οι προσεγγίσεις μοιάζουν πάρα πολύ. Υπάρχουν, όμως, οι εξής διαφορές:

1. Θα πρέπει να εκκινήσουμε από ένα εφικτό σημείο, έστω \mathbf{x}_0 , δηλαδή, θα πρέπει να έχουμε $\mathbf{x}_0 \in \text{dom } f$ και $\mathbf{A} \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$.

Συχνά, η εύρεση του αρχικού εφικτού σημείου είναι αρκετά δύσκολη και, ίσως, απαιτεί τη λύση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, υπό τη μορφή **ελέγχου εφικτότητας**.

2. Ο ορισμός του βήματος Newton θα πρέπει να γίνει έτσι ώστε να λαμβάνονται υπόψη οι περιορισμοί ισότητας, δηλαδή, θα πρέπει να έχουμε ότι $\mathbf{A}\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}} = \mathbf{0}$.

Αυτό, όπως θα δούμε στη συνέχεια, γενικά, είναι σχετικά απλό.

9.5 Βήμα Newton

Όπως και στην περίπτωση προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, το βήμα Newton μπορεί να εξαχθεί μέσω διαφόρων προσεγγίσεων.

9.5.1 Ορισμός μέσω ελαχιστοποίησης προσέγγισης δεύτερης τάξης

Η πρώτη προσέγγιση για τον υπολογισμό του βήματος Newton για το πρόβλημα

$$\begin{aligned} &\text{minimize} && f(\mathbf{x}) \\ &\text{subject to} && \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (9.15)$$

σε ένα εφικτό σημείο \mathbf{x} , δηλαδή, $\mathbf{x} \in \text{dom } f$ και $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, έχει ως εξής.

Αντικαθιστούμε τη συνάρτηση κόστους f από τη δεύτερης τάξης προσέγγισή της, στο σημείο \mathbf{x} , κατασκευάζοντας το τετραγωνικό πρόβλημα, με μεταβλητή \mathbf{z} ,

$$\begin{aligned} &\text{minimize} && \hat{f}(\mathbf{x} + \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{z} + \frac{1}{2} \mathbf{z}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{z} \\ &\text{subject to} && \mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{z}) = \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (9.16)$$

Ορίζουμε ως βήμα Newton για το πρόβλημα (9.15), στο εφικτό σημείο \mathbf{x} , τη λύση του προβλήματος (9.16), την οποία ονομάζουμε $\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}$.¹

Οι συνθήκες KKT για το τετραγωνικό πρόβλημα (9.16) έχουν ως εξής

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f(\mathbf{x}) \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (9.17)$$

όπου \mathbf{w} είναι η βέλτιστη δυϊκή μεταβλητή για το συγκεκριμένο τετραγωνικό πρόβλημα.

Αν $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succ \mathbf{O}$, τότε το σύστημα (9.17) έχει μοναδική λύση.

¹Υποθέτουμε ότι υπάρχει λύση.

Όπως και στα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, παρατηρούμε ότι, αν η συνάρτηση f είναι τετραγωνική, τότε ο αλγόριθμος Newton επιλύει το πρόβλημα βελτιστοποίησης σε ένα βήμα.

Συνεπώς, αναμένουμε ότι ο αλγόριθμος Newton θα συμπεριφέρεται (πολύ) καλά όταν η f προσεγγίζεται (πολύ) καλά από μία τετραγωνική συνάρτηση.

9.5.2 Ορισμός μέσω λύσης γραμμικοποιημένων συνθηκών βελτιστότητας

Μία άλλη ερμηνεία του βήματος Newton, στο σημείο \mathbf{x} , έχει ως εξής.

Είδαμε ότι οι συνθήκες βελτιστότητας για το πρόβλημα (9.1) δίνονται από τις σχέσεις

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) + \mathbf{A}^T \mathbf{v}_* = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A} \mathbf{x}_* = \mathbf{b}. \quad (9.18)$$

Αντί για το σύστημα (9.18), το οποίο, συνήθως, είναι μη γραμμικό, λύνουμε την εξής προσέγγισή του.

Αντικαθιστούμε το \mathbf{x}_* με το $\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{Nt}$ και το \mathbf{v}_* με το \mathbf{w} .

Αν, επιπλέον, αντικαταστήσουμε τη βαθμίδα $\nabla f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{Nt})$ με την πρώτης τάξης προσέγγισή της, στο σημείο \mathbf{x} ,

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) = \nabla f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{Nt}) \approx \nabla f(\mathbf{x}) + \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{Nt}, \quad (9.19)$$

τότε μία προσέγγιση της (9.18) έχει ως εξής:

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}) + \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{Nt} + \mathbf{A}^T \mathbf{w} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{Nt}) &= \mathbf{b}. \end{aligned} \quad (9.20)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, οι παραπάνω σχέσεις εκφράζονται ως

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{Nt} + \mathbf{A}^T \mathbf{w} = -\nabla f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{A} \Delta \mathbf{x}_{Nt} = \mathbf{0}, \quad (9.21)$$

οι οποίες ταυτίζονται με τις (9.17).

9.5.3 Αναλυτική έκφραση βήματος Newton

Όπως αποδεικνύουμε στο Παράρτημα, οι αναλυτικές εκφράσεις για το $\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}$ και το \mathbf{w} έχουν ως εξής:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = & -(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \\ & + (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{A}^T \left(\mathbf{A} (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{A}^T \right)^{-1} \mathbf{A} (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (9.22)$$

$$\mathbf{w} = - \left(\mathbf{A} (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{A}^T \right)^{-1} \mathbf{A} (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}). \quad (9.23)$$

Παρατηρήστε ότι αυτές οι δύο ποσότητες ικανοποιούν τις (9.21) και, ειδικότερα,

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = -(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} (\nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{A}^T \mathbf{w}). \quad (9.24)$$

9.5.4 Μείωση Newton

Όπως και στα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, ορίζουμε τη μείωση Newton στο εφικτό σημείο \mathbf{x} ως εξής:

$$\lambda(\mathbf{x}) := (\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}})^{\frac{1}{2}}. \quad (9.25)$$

Η ποσότητα $\lambda(\mathbf{x})$ παρέχει μία προσέγγιση της διαφοράς $f(\mathbf{x}) - p_*$, βασιζόμενη στη δεύτερης τάξης προσέγγιση της f , στο σημείο \mathbf{x} . Πιο συγκεκριμένα,

$$f(\mathbf{x}) - \inf \left\{ \hat{f}(\mathbf{x} + \mathbf{z}) \mid \mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{0} \right\} = \frac{\lambda^2(\mathbf{x})}{2}. \quad (9.26)$$

Η απόδειξη έχει ως εξής:

$$\begin{aligned} \inf \left\{ \hat{f}(\mathbf{x} + \mathbf{z}) \mid \mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{0} \right\} &= \hat{f}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}. \end{aligned} \quad (9.27)$$

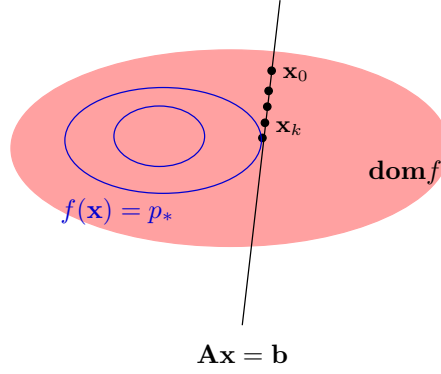
Από την (9.21), λαμβάνουμε ότι

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} &= -(\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) + \mathbf{w}^T \mathbf{A}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} \\ &= -\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} \\ &= -\lambda^2(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (9.28)$$

Συνδυάζοντας τις (9.27), (9.28), και (9.25), λαμβάνουμε την (9.26).

Τέλος, η μείωση Newton εμφανίζεται στην αναζήτηση γραμμής, διότι

$$\left. \frac{d}{dt} f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) \right|_{t=0} = \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = -\lambda^2(\mathbf{x}). \quad (9.29)$$



Σχήμα 9.1: Τροχιά $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_k$ αλγορίθμου Newton, εκκινώντας από εφικτό σημείο.

9.5.5 Εφικτή κατεύθυνση μείωσης

Έστω ότι ευρισκόμαστε στο εφικτό σημείο \mathbf{x} .

Τότε, το $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$ είναι εφικτή κατεύθυνση κίνησης αν $\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{0}$, και κατεύθυνση καθόδου αν, για αρκετά μικρό t , $f(\mathbf{x} + t\mathbf{z}) < f(\mathbf{x})$.

Το βήμα Newton $\Delta\mathbf{x}_{Nt}$ είναι πάντα εφικτό βήμα καθόδου, διότι

1. από το δεύτερο σύστημα εξισώσεων της (9.17), έχουμε ότι $\mathbf{A}\Delta\mathbf{x}_{Nt} = \mathbf{0}$,
2. εξαιτίας της (9.29), έχουμε ότι, για αρκετά μικρό t , $f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{Nt}) \leq f(\mathbf{x})$.

9.5.6 Αλγόριθμος Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο

Ο αλγόριθμος Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο παρατίθεται στον Πίνακα 9.1.

Όπως βλέπουμε στο Σχήμα 9.1, αν εκκινήσουμε από εφικτό αρχικό σημείο, έστω \mathbf{x}_0 , τότε, για $k \geq 0$, τα σημεία \mathbf{x}_k θα είναι εφικτά και θα ισχύει η ανισότητα $f(\mathbf{x}_k) < f(\mathbf{x}_{k-1})$, για κάθε k , εκτός εάν $\mathbf{x}_{k-1} = \mathbf{x}_*$.

9.6 Ανάλυση σύγκλισης

Η μέθοδος Newton για προβλήματα με περιορισμούς γραμμικών ισοτήτων, με εκκίνηση από εφικτό σημείο, έχει συμπεριφορά ανάλογη με αυτή της μεθόδου Newton για προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

```

x ∈ dom f, Ax = b, tolerance  $\epsilon$ .
while (TRUE)
    1. compute Newton step and decrement :  $\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}, \lambda(\mathbf{x})$ .
    2. quit if  $\lambda^2(\mathbf{x}) \leq \epsilon$ .
    3. Perform backtracking line search and choose t.
    4. x := x + t $\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}$ .

```

Πίνακας 9.1: Αλγόριθμος Newton για προβλήματα με περιορισμούς ισότητας με εκκίνηση από εφικτό σημείο.

Για στοιχεία της ανάλυσης σύγκλισης της μεθόδου δείτε το εδάφιο 10.2.4 του βιβλίου των Boyd, Vandenberghe.

9.7 Μέθοδος Newton με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τη σημαντική περίπτωση κατά την οποία εκκινούμε τον αλγόριθμο Newton από μη εφικτό $\mathbf{x} \in \text{dom } f$, δηλαδή, $\mathbf{Ax} \neq \mathbf{b}$.

Αυτό είναι δυνατό να συμβεί είτε διότι ο υπολογισμός ενός εφικτού σημείου είναι δύσκολος, για παράδειγμα, όταν $\text{dom } f \subset \mathbb{R}^n$, ή για οποιονδήποτε άλλο λόγο.

9.8 Βήμα Newton σε μη εφικτά σημεία

Επαναλαμβάνουμε ότι οι συνθήκες βελτιστότητας για το πρόβλημα (9.1) έχουν ως εξής:

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) + \mathbf{A}^T \mathbf{v}_* = \mathbf{0}, \quad \mathbf{Ax}_* = \mathbf{b}.$$

Έστω σημείο $\mathbf{x} \in \text{dom } f$ το οποίο δεν είναι εφικτό, δηλαδή,

$$\mathbf{Ax} \neq \mathbf{b}.$$

Στόχος μας είναι η εύρεση βήματος $\Delta \mathbf{x}$ τέτοιου ώστε το σημείο $\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}$ να είναι εφικτό και προσεγγιστικά βέλτιστο, δηλαδή,

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}) = \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x} \approx \mathbf{x}_*.$$

Αντικαθιστώντας στις συνθήκες βελτιστότητας το \mathbf{x}_* από το $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ και το \mathbf{v}_* από το \mathbf{w} , και χρησιμοποιώντας την πρώτη τάξης προσέγγιση

$$\nabla f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) \approx \nabla f(\mathbf{x}) + \nabla^2 f(\mathbf{x})\Delta\mathbf{x}, \quad (9.30)$$

λαμβάνουμε

$$\nabla f(\mathbf{x}) + \nabla^2 f(\mathbf{x})\Delta\mathbf{x} + \mathbf{A}^T \mathbf{w} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b}, \quad (9.31)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{x} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(\mathbf{x}) \\ \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \end{bmatrix}. \quad (9.32)$$

Η μόνη διαφορά της σχέσης (9.32), η οποία ορίζει το βήμα Newton σε ένα μη εφικτό σημείο, από τη σχέση (9.17), η οποία ορίζει το βήμα Newton σε ένα εφικτό σημείο, ευρίσκεται στο δεύτερο όρο του δεξιού μέλους, ο οποίος είναι $\mathbf{Ax} - \mathbf{b}$ στην (9.32), ενώ είναι μηδέν στην (9.17).

Αν το \mathbf{x} είναι εφικτό, τότε οι δύο αυτοί όροι ταυτίζονται.

Αν, όμως, το \mathbf{x} δεν είναι εφικτό, τότε οι δύο όροι διαφέρουν.

Θα πρέπει να σημειώσουμε ότι, αν το \mathbf{x} δεν είναι εφικτό και κινηθούμε κατά $\Delta\mathbf{x}$, τότε το ανανεωμένο \mathbf{x} θα είναι εφικτό.

Μία εξαιρετικά ενδιαφέρουσα περίπτωση είναι αυτή κατά την οποία το \mathbf{x} δεν είναι εφικτό αλλά δεν είναι δυνατό να κινηθούμε κατά $\Delta\mathbf{x}$ διότι $\mathbf{dom} f \subset \mathbb{R}^n$ και $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x} \notin \mathbf{dom} f$.

Αυτή η περίπτωση θα μας απασχολήσει στη συνέχεια.

9.8.1 Ερμηνεία ως πρωτογενές - δυϊκό βήμα Newton

Έστω η συνάρτηση $r : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p$, η οποία ορίζεται ως

$$r(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = (r_{\text{dual}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}), r_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v})), \quad (9.33)$$

με

$$r_{\text{dual}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{A}^T \mathbf{v}, \quad r_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}. \quad (9.34)$$

Οι συνθήκες βελτιστότητας (9.2) του προβλήματος (9.1) μπορούν να εκφραστούν ως

$$r(\mathbf{x}_*, \mathbf{v}_*) = \mathbf{0}. \quad (9.35)$$

Συνεπώς, οι ποσότητες $r_{\text{dual}}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ και $r_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$, οι οποίες υποδεικνύουν “πόσο απέχει το σημείο (\mathbf{x}, \mathbf{v}) από το βέλτιστο σημείο,” μπορούν να χαρακτηριστούν, αντίστοιχα, ως **δυϊκό υπόλοιπο** (dual residual) και **πρωτογενές υπόλοιπο** (primal residual), στο σημείο (\mathbf{x}, \mathbf{v}) .

Η πρώτης τάξης προσέγγιση της συνάρτησης r , στο σημείο $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$, δίνεται από τη σχέση

$$r(\mathbf{y} + \mathbf{z}) \approx r_{\mathbf{y}}(\mathbf{z}) = r(\mathbf{y}) + Dr(\mathbf{y})\mathbf{z}, \quad (9.36)$$

όπου $Dr(\mathbf{y})$ είναι η παράγωγος της r στο \mathbf{y} .

Η $r_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ είναι αφφινική συνάρτηση του \mathbf{z} .

Ορίζουμε ως **πρωτογενές – δυϊκό βήμα Newton** (primal-dual Newton step),

$$\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} := (\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}),$$

στο σημείο \mathbf{y} , το \mathbf{z} για το οποίο η πρώτης τάξης προσέγγιση $r_{\mathbf{y}}(\mathbf{z})$ **μηδενίζεται**, δηλαδή,

$$Dr(\mathbf{y})\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} = -r(\mathbf{y}). \quad (9.37)$$

Δηλαδή, το πρωτογενές – δυϊκό βήμα Newton ορίζεται ως προς το \mathbf{x} και το \mathbf{v} .

Η παράγωγος $Dr(\mathbf{y}) = Dr(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ έχει ως εξής

$$Dr(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{bmatrix} Dr_{\text{dual}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \\ Dr_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix}, \quad (9.38)$$

συνεπώς, η (9.37) μπορεί να εκφραστεί ως

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\text{pd}} \\ \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} r_{\text{dual}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \\ r_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(\mathbf{x}) + \mathbf{A}^T \mathbf{v} \\ \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \end{bmatrix}. \quad (9.39)$$

Θέτοντας $\mathbf{v}_+ = \mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}$, λαμβάνουμε τη σχέση

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\text{pd}} \\ \mathbf{v}_+ \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla f(\mathbf{x}) \\ \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \end{bmatrix}, \quad (9.40)$$

η οποία ταυτίζεται με την (9.32) για

$$\Delta \mathbf{x} = \Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \quad \mathbf{w} = \mathbf{v}_+ = \mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}. \quad (9.41)$$

9.8.2 Μείωση μεγέθους υπολοίπου

Υπενθυμίζουμε ότι η κατεύθυνση Newton, $\Delta \mathbf{x}$, σε ένα **μη εφικτό σημείο** \mathbf{x} δίνεται από τη σχέση (9.31).

Η κατεύθυνση $\Delta \mathbf{x}$ δεν είναι αναγκαστικά κατεύθυνση καθόδου για την f , στο σημείο \mathbf{x} , διότι η ποσότητα

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} f(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}) \right|_{t=0} &= \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x} \\ &\stackrel{(9.31)}{=} -\Delta \mathbf{x}^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x} + \mathbf{A}^T \mathbf{w}) \\ &\stackrel{(9.40)}{=} -\Delta \mathbf{x}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x} + (\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{w} \end{aligned} \quad (9.42)$$

δεν είναι αναγκαστικά αρνητική (εκτός εάν $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$).

Αυτό το γεγονός έχει διάφορες συνέπειες.

Για παράδειγμα, δεν μπορούμε να μιλήσουμε για “μείωση Newton,” με ό,τι αυτό συνεπάγεται.

Όμως, η ερμηνεία της ποσότητας $\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} = (\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}})$ ως πρωτογενούς – δυϊκού βήματος Newton επιτρέπει τη συσχέτιση του βήματος $\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}$ με μία άλλη συνάρτηση.

Η παράγωγος κατά κατεύθυνση της συνάρτησης $\|r\|_2^2$, στο σημείο \mathbf{y} και στην κατεύθυνση $\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}$, έχει ως εξής²

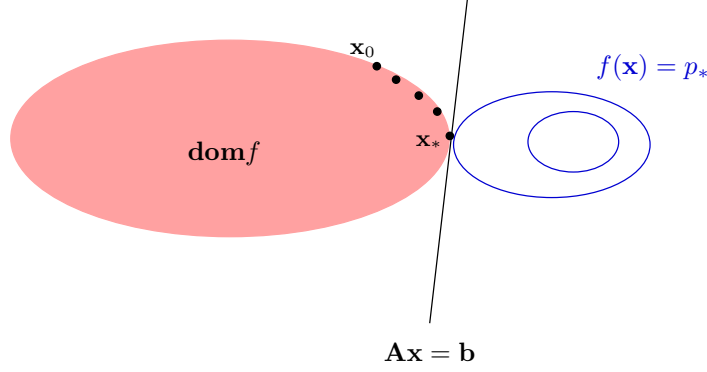
$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dt} \|r(\mathbf{y} + t\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2^2 \right|_{t=0} &= 2r(\mathbf{y})^T Dr(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} \\ &= -2r(\mathbf{y})^T r(\mathbf{y}) \\ &= -2\|r(\mathbf{y})\|_2^2 \\ &\leq 0. \end{aligned} \quad (9.43)$$

Άρα, η κατεύθυνση $\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}$ είναι κατεύθυνση καθόδου για τη συνάρτηση $\|r\|_2^2$.

Αυτό το γεγονός επιτρέπει τη χρήση της ποσότητας $\|r\|_2$ ως μέτρο προόδου της μεθόδου Newton, με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο, και μπορεί να χρησιμοποιηθεί, για παράδειγμα, σε αναζήτηση γραμμής ή/και σε κριτήρια τερματισμού αλγορίθμων.

²Από τον κανόνα αλυσίδας, έχουμε

$$D(g \circ r \circ \mathbf{c})(t) = Dg((r \circ \mathbf{c})(t)) D(r \circ \mathbf{c})(t) = Dg((r \circ \mathbf{c})(t)) Dr(\mathbf{c}(t)) D\mathbf{c}(t).$$



Σχήμα 9.2: Τροχιά $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_*$ αλγορίθμου Newton, εκκινώντας από μη εφικτό σημείο.

9.8.3 Ιδιότητα εφικτότητας πλήρους βήματος

Όπως είδαμε, αν ευρισκόμαστε σε μη εφικτό σημείο και κινηθούμε κατά $\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}$, τότε θα φθάσουμε σε εφικτό σημείο.

Αν, όμως, κινηθούμε κατά $t\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}$, με $t \in (0, 1)$, τότε το νέο σημείο θα εξακολουθήσει να μην είναι εφικτό.

Αν ορίσουμε $\mathbf{x}_+ = \mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}$, και $\mathbf{v}_+ = \mathbf{v} + t\Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}$, τότε

$$\begin{aligned} r_{\text{primal}}(\mathbf{x}_+, \mathbf{v}_+) &= \mathbf{A}(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}) - \mathbf{b} \\ &\stackrel{(a)}{=} (1 - t)(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) \\ &= (1 - t)r_{\text{primal}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}), \end{aligned} \tag{9.44}$$

όπου στο σημείο (a) χρησιμοποιήσαμε το ότι, εξαιτίας της σχέσης (9.39), $\mathbf{A}\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}} = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$.

Δουλεύοντας αναδρομικά, λαμβάνουμε ότι

$$r_{\text{primal}}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) = \left(\prod_{i=0}^{k-1} (1 - t_k) \right) r_{\text{primal}}(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0). \tag{9.45}$$

Προφανώς, αν για κάποιο k έχουμε ότι $t_k = 1$, τότε τα σημεία \mathbf{x}_l , για $l > k$, θα είναι εφικτά και το πρωτογενές υπόλοιπο θα είναι μηδέν.

9.8.4 Αλγόριθμος Newton με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο

Μία μορφή του αλγορίθμου Newton με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο παρατίθεται στον Πίνακα 9.2 (δείτε και το Σχήμα 9.2).

$\mathbf{x} \in \text{dom } f, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^p$, tolerance ϵ .

Repeat

1. compute primal and dual Newton steps : $\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}$.

2. Backtracking line search

$t := 1$

while $\|r(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \mathbf{v} + t\Delta \mathbf{v}_{\text{pd}})\|_2 > (1 - \alpha t)\|r(\mathbf{x}, \mathbf{v})\|_2$

$t := \beta t$.

3. $\mathbf{x} := \mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{pd}}, \mathbf{v} := \mathbf{v} + t\Delta \mathbf{v}_{\text{pd}}$.

until $\|r(\mathbf{x}, \mathbf{v})\|_2 \leq \epsilon$.

Πίνακας 9.2: Αλγόριθμος Newton για προβλήματα με περιορισμούς ισότητας και εκκίνηση από μη εφικτό σημείο (primal–dual).

Μία προφανής παραλλαγή είναι η εξής. Αν, σε κάποιο βήμα, επιλέξουμε $t = 1$, τότε το επόμενο σημείο θα είναι εφικτό και, συνεπώς, μπορούμε να συνεχίσουμε με τον αλγόριθμο Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο.

Η κύρια διαφορά μεταξύ των δύο αυτών προσεγγίσεων ευρίσκεται στην αναζήτηση γραμμής.

Πάντως, η διαφορά αυτή δεν φαίνεται να οδηγεί σε σημαντική διαφοροποίηση της συμπεριφοράς των μεθόδων.

9.8.5 Απλοποίηση αρχικοποίησης μέσω Newton με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο

Όπως είδαμε, όταν $\text{dom } f \subset \mathbb{R}^n$, τότε η εύρεση ενός εφικτού σημείου ίσως είναι δύσκολη.

Σε αυτή την περίπτωση, μία προσέγγιση είναι η λύση του προβλήματος σε δύο φάσεις.

Στη Φάση I, λύνουμε ένα πρόβλημα εφικτότητας (feasibility problem).

Αν αυτό το πρόβλημα έχει λύση, τότε μπορούμε να προχωρήσουμε στη Φάση II, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο.

Αν το $\text{dom } f$ είναι σχετικά απλό και γνωρίζουμε ότι το πρόβλημα είναι εφικτό, τότε ίσως είναι προτιμότερο να χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο Newton με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο.

Παράδειγμα 9.8.1. Έστω το πρόβλημα

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && f(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^n \log x_i \\ & \text{subject to} && \mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \end{aligned} \quad (9.46)$$

με $\mathbf{dom} f = \mathbb{R}_{++}^n$. Μπορούμε να ακολουθήσουμε τις εξής προσεγγίσεις.

1. Εύρεση σημείου \mathbf{x}_0 , αν υπάρχει, με $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{dom} f$ και $\mathbf{Ax}_0 = \mathbf{b}$, και κατόπιν χρήση του αλγορίθμου Newton με εκκίνηση από εφικτό σημείο.

Η εύρεση εφικτού αρχικού σημείου απαιτεί τη λύση του **προβλήματος εφικτότητας** (feasibility problem)

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && f(\mathbf{x}) = 0 \\ & \text{subject to} && \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \\ & && \mathbf{x} > \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Σημειώνουμε ότι, μέχρι στιγμής, δεν γνωρίζουμε πώς να λύσουμε το πρόβλημα (9.47), διότι περιέχει ανισότητες. Θα το μάθουμε στο επόμενο κεφάλαιο.

2. Εκκίνηση από μη εφικτό σημείο $\mathbf{x} \in \mathbf{dom} f$, για παράδειγμα, $\mathbf{x} = \mathbf{1}$, και χρήση του αλγορίθμου primal–dual.
3. Επίλυση του δυϊκού προβλήματος (αν έχει λύση)

$$\text{maximize } g(\mathbf{v}) = -\mathbf{b}^T \mathbf{v} + \sum_{i=1}^n \log (\mathbf{A}^T \mathbf{v})_i + n, \quad (9.48)$$

και υπολογισμός της λύσης του πρωτογενούς προβλήματος μέσω της λύσης του δυϊκού. Πιο συγκεκριμένα, αν \mathbf{v}_* είναι η λύση του δυϊκού προβλήματος, τότε

$$x_{*,i} = 1 / (\mathbf{A}^T \mathbf{v}_*)_i, \quad \text{για } i = 1, \dots, n. \quad (9.49)$$

□

Αντιλαμβανόμαστε ότι για την επίλυση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, γενικά, υπάρχουν περισσότερες από μία προσεγγίσεις. Είναι εξαιρετικά σημαντικό να γνωρίζουμε τα υπέρ και τα κατά καθεμιάς, ώστε να (προσπαθούμε να) επιλέγουμε την πιο κατάλληλη.

9.9 Ανάλυση σύγκλισης

Στη συνέχεια, αποδεικνύουμε ότι, υπό ορισμένες υποθέσεις, ο αλγόριθμος Newton, με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο, συγκλίνει στη βέλτιστη λύση. Η συμπεριφορά σύγκλισης του αλγορίθμου διακρίνεται σε δύο φάσεις, στη φάση με απόσβεση, κατά την οποία το μέγεθος του υπολοίπου μειώνεται κατά, τουλάχιστον, μία σταθερή ποσότητα, και στη φάση τετραγωνικής σύγκλισης.

9.9.1 Υποθέσεις

Για την ανάλυση σύγκλισης του αλγορίθμου Newton κάνουμε τις εξής υποθέσεις:

1. Το σύνολο υποστάθμης

$$\mathbb{S} := \{(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \mid \mathbf{x} \in \text{dom } f, \|r(\mathbf{x}, \mathbf{v})\|_2 \leq \|r(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)\|_2\} \quad (9.50)$$

είναι κλειστό.

2. Αν $(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \in \mathbb{S}$, τότε υπάρχει θετικός πραγματικός αριθμός K τέτοιος ώστε

$$\|(Dr(\mathbf{x}, \mathbf{v}))^{-1}\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} \nabla^2 f(\mathbf{x}) & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix}^{-1} \right\|_2 \leq K. \quad (9.51)$$

3. Για $(\mathbf{x}, \mathbf{v}), (\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}}) \in \mathbb{S}$, η συνάρτηση Dr ικανοποιεί τη συνθήκη συνέχειας Lipschitz, δηλαδή, υπάρχει θετικός πραγματικός αριθμός L τέτοιος ώστε

$$\|Dr(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - Dr(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}})\|_2 \leq L\|(\mathbf{x}, \mathbf{v}) - (\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{v}})\|_2. \quad (9.52)$$

9.9.2 Βασική ανισότητα

Έστω σημείο $\mathbf{y} := (\mathbf{x}, \mathbf{v}) \in \mathbb{S}$, με $\|r(\mathbf{y})\|_2 \neq 0$, και $\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} := (\Delta\mathbf{x}_{\text{pd}}, \Delta\mathbf{v}_{\text{pd}})$ το βήμα Newton στο σημείο \mathbf{y} . Ορίζουμε

$$t_{\max} := \inf\{t > 0 \mid \mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} \notin \mathbb{S}\}. \quad (9.53)$$

Αν $\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} \in \mathbb{S}$ για κάθε $t > 0$, τότε θέτουμε $t_{\max} = \infty$. Διαφορετικά, το t_{\max} είναι η μικρότερη δυνατή τιμή του t για την οποία $\|r(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 = \|r(\mathbf{y})\|_2$. Ειδικότερα, αν $0 \leq t \leq t_{\max}$, τότε $\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}} \in \mathbb{S}$.

Θα αποδείξουμε ότι, για $0 \leq t \leq \min\{1, t_{\max}\}$, ισχύει η ανισότητα

$$\|r(\mathbf{y} + t\Delta\mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 \leq (1 - t)\|r(\mathbf{y})\|_2 + \frac{K^2 L t^2}{2} \|r(\mathbf{y})\|_2^2. \quad (9.54)$$

Χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας, λαμβάνουμε

$$D \{r(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\} = Dr(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}. \quad (9.55)$$

Συνεπώς,

$$\begin{aligned} r(\mathbf{y} + t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) &= r(\mathbf{y}) + \int_0^1 Dr(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} d\tau \\ &= r(\mathbf{y}) + t Dr(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} + \int_0^1 (Dr(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) - Dr(\mathbf{y})) t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} d\tau \\ &= r(\mathbf{y}) + t Dr(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} + \mathbf{e} \\ &\stackrel{(a)}{=} (1 - t)r(\mathbf{y}) + \mathbf{e}, \end{aligned} \quad (9.56)$$

όπου ορίσαμε

$$\mathbf{e} := \int_0^1 (Dr(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) - Dr(\mathbf{y})) t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} d\tau \quad (9.57)$$

και στο σημείο (a) χρησιμοποιήσαμε τη σχέση $Dr(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} = -r(\mathbf{y})$. Έστω $0 \leq t \leq t_{\max}$. Τότε $\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}} \in \mathbb{S}$, για κάθε $0 \leq \tau \leq 1$, και

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}\|_2 &\leq \|t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}\|_2 \int_0^1 \|Dr(\mathbf{y} + \tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}) - Dr(\mathbf{y})\|_2 d\tau \\ &\leq \|t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}\|_2 \int_0^1 L \|\tau t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}\|_2 d\tau \\ &= \frac{Lt^2}{2} \|\Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}\|_2^2 \\ &= \frac{Lt^2}{2} \|(Dr(\mathbf{y}))^{-1} r(\mathbf{y})\|_2^2 \\ &\leq \frac{Lt^2}{2} \|(Dr(\mathbf{y}))^{-1}\|_2^2 \|r(\mathbf{y})\|_2^2 \\ &\leq \frac{K^2 Lt^2}{2} \|r(\mathbf{y})\|_2^2. \end{aligned} \quad (9.58)$$

Συνεπώς, για $0 \leq t \leq \min\{1, t_{\max}\}$, έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \|r(\mathbf{y} + t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 &= \|(1 - t)r(\mathbf{y}) + \mathbf{e}\|_2 \\ &\leq (1 - t)\|r(\mathbf{y})\|_2 + \|\mathbf{e}\|_2 \\ &\leq (1 - t)\|r(\mathbf{y})\|_2 + \frac{K^2 Lt^2}{2} \|r(\mathbf{y})\|_2^2. \end{aligned} \quad (9.59)$$

9.9.3 Φάση I

Αρχικά, θα αποδείξουμε ότι, αν $\|r(\mathbf{y})\|_2 > \frac{1}{K^2 L}$, τότε μία επανάληψη του αλγορίθμου Newton, με εκκίνηση από μη εφικτό σημείο, μειώνει το $\|r(\mathbf{y})\|_2$ κατά, τουλάχιστον, μία σταθερά.

Το δεξιό μέλος της βασικής ανισότητας (9.54) είναι τετραγωνικό ως προς t , και μονοτονικά φθίνον ανάμεσα στο $t = 0$ και στο σημείο ελαχίστου

$$\bar{t} := \frac{1}{K^2 L \|r(\mathbf{y})\|_2} < 1. \quad (9.60)$$

Θα πρέπει να έχουμε $t_{\max} > \bar{t}$, διότι το αντίστροφο θα οδηγούσε στο $\|r(\mathbf{y} + t_{\max} \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 < \|r(\mathbf{y})\|_2$, το οποίο είναι ψευδές. Η (9.54) είναι αληθής για $t = \bar{t}$, συνεπώς

$$\begin{aligned} \|r(\mathbf{y} + \bar{t} \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 &\leq \|r(\mathbf{y})\|_2 - \frac{1}{2K^2 L} \\ &\leq \|r(\mathbf{y})\|_2 - \frac{\alpha}{K^2 L} \\ &= (1 - \alpha \bar{t}) \|r(\mathbf{y})\|_2. \end{aligned} \quad (9.61)$$

Άρα, η αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση επιστρέφει $t \geq \beta \bar{t}$. Άρα

$$\begin{aligned} \|r(\mathbf{y} + t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 &\leq (1 - \alpha t) \|r(\mathbf{y})\|_2 \\ &\leq (1 - \alpha \beta \bar{t}) \|r(\mathbf{y})\|_2 \\ &= \left(1 - \frac{\alpha \beta}{K^2 L \|r(\mathbf{y})\|_2}\right) \|r(\mathbf{y})\|_2 \\ &= \|r(\mathbf{y})\|_2 - \frac{\alpha \beta}{K^2 L}. \end{aligned} \quad (9.62)$$

Άρα, αν $\|r(\mathbf{y})\|_2 > \frac{1}{K^2 L}$, τότε η ελάχιστη μείωση ανά επανάληψη του αλγορίθμου ισούται με $\frac{\alpha \beta}{K^2 L}$. Συνεπώς, η Φάση I απαιτεί το πολύ

$$\frac{\|r(\mathbf{y}_0)\|_2 K^2 L}{\alpha \beta} \quad (9.63)$$

επαναλήψεις.

9.9.4 Φάση II

Έστω ότι $\|r(\mathbf{y})\|_2 \leq \frac{1}{K^2 L}$. Από την (9.54), έχουμε ότι, για $0 \leq t \leq \min\{1, t_{\max}\}$,

$$\|r(\mathbf{y} + t \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 \leq \left(1 - t + \frac{t^2}{2}\right) \|r(\mathbf{y})\|_2 \quad (9.64)$$

Θα πρέπει να ισχύει ότι $t_{\max} > 1$ διότι διαφορετικά θα είχαμε $\|r(\mathbf{y} + t_{\max} \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 < \|r(\mathbf{y})\|_2$, το οποίο έρχεται σε αντίφαση με τον ορισμό του t_{\max} . Συνεπώς, η (9.64) ισχύει για $t = 1$ και

$$\|r(\mathbf{y} + \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}})\|_2 \leq \frac{1}{2} \|r(\mathbf{y})\|_2 \leq (1 - \alpha) \|r(\mathbf{y})\|_2. \quad (9.65)$$

Αυτό σημαίνει ότι η συνθήκη οπισθοχώρησης ικανοποιείται για $t = 1$ και, συνεπώς, θα κινηθούμε κατά το βήμα Newton. Το ίδιο θα συμβεί και στις επόμενες επαναλήψεις. Θέτοντας $\mathbf{y}_+ = \mathbf{y} + \Delta \mathbf{y}_{\text{pd}}$, η (9.54) μπορεί να εκφραστεί στη μορφή

$$\frac{K^2 L \|r(\mathbf{y}_+)\|_2}{2} \leq \left(\frac{K^2 L \|r(\mathbf{y})\|_2}{2} \right)^2 \quad (9.66)$$

Αν με $r(\mathbf{y}_{+k})$ συμβολίσουμε το υπόλοιπο k βήματα μετά από μία επανάληψη για την οποία έχουμε ότι $\|r(\mathbf{y})\|_2 \leq \frac{1}{K^2 L}$, τότε

$$\frac{K^2 L \|r(\mathbf{y}_{+k})\|_2}{2} \leq \left(\frac{K^2 L \|r(\mathbf{y})\|_2}{2} \right)^{2^k} \leq \left(\frac{1}{2} \right)^{2^k}, \quad (9.67)$$

δηλαδή, έχουμε τετραγωνική σύγκλιση του $\|r(\mathbf{y})\|_2$ στο μηδέν.

Για να αποδείξουμε ότι η ακολουθία $\{\mathbf{y}_k\}$ συγκλίνει, θα αποδείξουμε ότι είναι ακολουθία Cauchy. Έστω ότι σε κάποια επανάληψη ευρισκόμαστε στο σημείο \mathbf{y} με $r(\mathbf{y}) \leq \frac{1}{K^2 L}$ και \mathbf{y}_{+k} η k -οστή τιμή μετά το \mathbf{y} . Αφού οι επαναλήψεις ανήκουν στη Φάση II, λαμβάνουμε ότι το βήμα οπισθοχώρησης κάθε επανάληψης θα είναι $t = 1$. Τότε

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}_{+k} - \mathbf{y}\|_2 &\leq \|\mathbf{y}_{+k} - \mathbf{y}_{+(k-1)}\|_2 + \cdots + \|\mathbf{y}_+ - \mathbf{y}\|_2 \\ &= \left\| (Dr(\mathbf{y}_{+(k-1)}))^{-1} r(\mathbf{y}_{+(k-1)}) \right\|_2 + \cdots + \left\| (Dr(\mathbf{y}))^{-1} r(\mathbf{y}) \right\|_2 \\ &\stackrel{(a)}{\leq} K (\|r(\mathbf{y}_{+(k-1)})\|_2 + \cdots + \|r(\mathbf{y})\|_2) \\ &\leq K \|r(\mathbf{y})\|_2 \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{K^2 L \|r(\mathbf{y})\|_2}{2} \right)^{2^i - 1} \\ &\leq K \|r(\mathbf{y})\|_2 \sum_{i=0}^{k-1} \left(\frac{1}{2} \right)^{2^i - 1} \\ &\leq 2K \|r(\mathbf{y})\|_2 \end{aligned} \quad (9.68)$$

όπου στο σημείο (a) χρησιμοποιήσαμε το ότι $\|Dr^{-1}\|_2 \leq K$ για όλες τις επαναλήψεις. Αφού το $r(\mathbf{y})$ τείνει στο μηδέν, συμπεραίνουμε ότι η ακολουθία $\{\mathbf{y}_k\}$ είναι ακολουθία Cauchy, συνεπώς, συγκλίνει. Εξαιτίας της συνέχειας της r , το οριακό σημείο, έστω \mathbf{y}_* , ικανοποιεί τη σχέση $r(\mathbf{y}_*) = \mathbf{0}$.

Παράρτημα

Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιήσουμε το λεγόμενο **λήμμα αντιστροφής πινάκων** (matrix inversion lemma). Το λήμμα αντιστροφής πινάκων έχει διάφορες μορφές και μπορεί να ευρεθεί σε οποιοδήποτε καλό βιβλίο Γραμμικής Άλγεβρας ή Θεωρίας Πινάκων.

Στη συνέχεια, υποθέτουμε ότι ο \mathbf{P} είναι αντιστρέψιμος και ο \mathbf{A} πλήρους βαθμού γραμμών. Με εφαρμογή του λήμματος αντιστροφής πινάκων για διαμερισμένους πίνακες, λαμβάνουμε

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}^{-1} - \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} & \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1} \\ (\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} & -(\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1} \end{bmatrix}.$$

Θέτουμε $\mathbf{P} = \nabla^2 f(\mathbf{x})$ και $\mathbf{q} = \nabla f(\mathbf{x})$. Τότε, από την (9.17), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} \\ \mathbf{w} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{P} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & \mathbf{O} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -\mathbf{q} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -\mathbf{P}^{-1}\mathbf{q} + \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{q} \\ -(\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^T)^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{q} \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{9.69}$$