

Κεφάλαιο 5

Κυρτή βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

5.1 Προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς

Το πρόβλημα το οποίο θα μελετήσουμε σε αυτό το κεφάλαιο είναι το

$$\text{minimize } f(\mathbf{x}) \tag{5.1}$$

όπου $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι διπλά διαφορίσιμη κυρτή πραγματική συνάρτηση.

Στη συνέχεια, θα υποθέσουμε ότι το πρόβλημα (5.1) έχει λύση, και ότι η ελάχιστη τιμή της f ισούται με p_* . Συνεπώς, υπάρχει $\mathbf{x}_* \in \mathbb{R}^n$, τέτοιο ώστε $f(\mathbf{x}_*) = p_*$.

Όπως είδαμε, ένα σημείο $\mathbf{x}_* \in \mathbb{R}^n$ είναι λύση του προβλήματος (5.1) αν, και μόνο αν,

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) = \mathbf{0}. \tag{5.2}$$

Η σχέση (5.2) είναι ένα σύστημα, συνήθως, μη-γραμμικών εξισώσεων, το οποίο σπάνια έχει λύση σε κλειστή μορφή, και το οποίο, συνήθως, επιλύεται μέσω επαναληπτικών διαδικασιών.

Μία επαναληπτική διαδικασία για την επίλυση του (5.2) είναι μία διαδικασία η οποία παράγει μία ακολουθία σημείων $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ τέτοια ώστε $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}_*$, όταν $k \rightarrow \infty$.

Το σύστημα (5.2) μπορεί να επιλυθεί μέσω άμεσων ή έμμεσων επαναληπτικών διαδικασιών.

Μία άμεση επαναληπτική διαδικασία προσπαθεί να υπολογίσει το \mathbf{x}_* λύνοντας το σύστημα (5.2), ενώ μία έμμεση προσπαθεί να εκμεταλλευτεί ιδιότητες της f και να υπολογίσει το \mathbf{x}_* εμμέσως.

5.2 Αρχικό σημείο και σύνολα υποστάθμης

Οι μέθοδοι που θα παρουσιάσουμε εκκινούν από ένα αρχικό σημείο \mathbf{x}_0 το οποίο ανήκει στο $\mathbf{dom} f$ και για το οποίο θα πρέπει να ισχύει ότι το σύνολο

$$\mathbb{S} = \{\mathbf{x} \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\} \quad (5.3)$$

είναι κλειστό.

Αυτή η συνθήκη ικανοποιείται αν $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{dom} f$ και η f είναι κλειστή συνάρτηση, δηλαδή, όταν όλα τα σύνολα υποστάθμης της f είναι κλειστά σύνολα.

Δύο σημαντικές περιπτώσεις κλειστών συναρτήσεων έχουν ως εξής:

1. συνεχείς συναρτήσεις f με πεδίο ορισμού $\mathbf{dom} f = \mathbb{R}^n$ είναι κλειστές. Παράδειγμα: η $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ με τύπο

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x} + c, \quad (5.4)$$

με $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T \succ \mathbf{0}$, είναι κλειστή.

2. συνεχείς συναρτήσεις με πεδίο ορισμού $\mathbf{dom} f$ ανοιχτό σύνολο, για τις οποίες ισχύει ότι η $f(\mathbf{x})$ τείνει στο άπειρο όταν το \mathbf{x} πλησιάζει το $\mathbf{bd} \mathbf{dom} f$, είναι κλειστές. Παράδειγμα: η $f : \mathbf{dom} f \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ με τύπο

$$f(\mathbf{x}) = - \sum_{i=1}^m \log(b_i - \mathbf{a}_i^T \mathbf{x}). \quad (5.5)$$

Το πεδίο ορισμού της f είναι το

$$\mathbf{dom} f = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} < b_i, i = 1, \dots, m\}. \quad (5.6)$$

Παρατηρήστε ότι, όταν το \mathbf{x} πλησιάζει στο σύνορο του πεδίου ορισμού, τότε η f τείνει στο άπειρο.

5.3 Μέθοδοι καθόδου

Η πρώτη μέθοδος την οποία θα μελετήσουμε είναι μία έμμεση επαναληπτική διαδικασία για την επίλυση της (5.1) ή, ισοδύναμα, της (5.2) και περιγράφεται ως εξής.

Έστω ότι στο k -οστό βήμα της διαδικασίας η εκτίμησή μας για τη λύση της (5.2) είναι το σημείο \mathbf{x}_k .

Το επόμενο σημείο δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t_k \Delta \mathbf{x}_k, \quad (5.7)$$

για κατάλληλα επιλεγμένα $t_k > 0$ και $\Delta \mathbf{x}_k$.

Φαίνεται λογικό τα t_k και $\Delta \mathbf{x}_k$ να επιλέγονται τέτοια ώστε

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) \leq f(\mathbf{x}_k), \quad (5.8)$$

με ισότητα μόνο αν $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_*$.

Τέτοιες επαναληπτικές μέθοδοι καλούνται **μέθοδοι καθόδου** (descent methods).

Εξαιτίας της κυρτότητας της f , γνωρίζουμε ότι, αν $\nabla f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}_k) \geq 0$, τότε $f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}_k)$.

Συνεπώς, για να αναπτύξουμε μία μέθοδο καθόδου θα πρέπει να επιλέξουμε το $\Delta \mathbf{x}_k$ έτσι ώστε

$$\nabla f(\mathbf{x}_k)^T \Delta \mathbf{x}_k < 0, \quad (5.9)$$

δηλαδή, $\cos \angle (\Delta \mathbf{x}_k, \nabla f(\mathbf{x}_k)) < 0$.

Μία τέτοια κατεύθυνση κίνησης καλείται **κατεύθυνση καθόδου** (descent direction).

Σε αυτή την περίπτωση, το t_k επιλέγεται ως

$$t_k = \underset{t > 0}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}_k + t \Delta \mathbf{x}_k). \quad (5.10)$$

$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $k = 0$.

While (stopping criterion is FALSE)

1. $\Delta \mathbf{x}_k := -\nabla f(\mathbf{x}_k)$.
 2. Line search and choose t_k .
 3. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t_k \Delta \mathbf{x}_k$.
 4. $k := k + 1$.
-

Πίνακας 5.1: Αλγόριθμος βαθμίδας.

5.4 Μέθοδος βαθμίδας

Από τις πιο διαδομένες επιλογές για το $\Delta \mathbf{x}_k$ είναι να θέσουμε

$$\Delta \mathbf{x}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (5.11)$$

Η κατεύθυνση αυτή καλείται **κατεύθυνση αρνητικής βαθμίδας** (negative gradient direction).

Προφανώς, η επιλογή (5.11) ικανοποιεί την σχέση (5.9).

Γεωμετρικά, κινούμαστε από το σημείο \mathbf{x}_k στην κατεύθυνση κατά μήκος της οποίας ο ρυθμός μείωσης της f είναι μέγιστος.

Στον Πίνακα 5.1, περιγράφουμε τον αλγόριθμο βαθμίδας.

Συνήθως, για λόγους τους οποίους θα εξηγήσουμε στη συνέχεια, σαν κριτήριο τερματισμού θέτουμε το $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 < \epsilon$, για κάποιο “μικρό” $\epsilon > 0$.

5.4.1 Αναζήτηση γραμμής

Όπως έχουμε δει, για δεδομένη κατεύθυνση κίνησης καθόδου $\Delta \mathbf{x}_k$, το πρόβλημα της αναζήτησης γραμμής εκφράζεται ως

$$t_k = \underset{t > 0}{\operatorname{argmin}} f(\mathbf{x}_k + t \Delta \mathbf{x}_k). \quad (5.12)$$

5.4.2 Ακριβής αναζήτηση γραμμής

Όταν η λύση του προβλήματος (5.12) εκφράζεται σε κλειστή μορφή ή είναι σχετικά εύκολο να υπολογιστεί με ακρίβεια, τότε υιοθετούμε την μέθοδο ακριβούς υπολογισμού του t_k .

Παράδειγμα 5.4.1. Ακριβής αναζήτηση γραμμής για τετραγωνική συνάρτηση κόστους και κατεύθυνση αρνητικής βαθμίδας.

Έστω η τετραγωνική συνάρτηση κόστους $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, με

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x}, \quad (5.13)$$

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

Όπως έχουμε δείξει, η βαθμίδα της συνάρτησης f ισούται με

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}. \quad (5.14)$$

Για να λύσουμε το πρόβλημα αναζήτησης γραμμής, ορίζουμε τη συνάρτηση

$$g(t) := f(\mathbf{x} - t \nabla f(\mathbf{x})) \quad (5.15)$$

και αναζητούμε το

$$t_* = \underset{t \geq 0}{\operatorname{argmin}} g(t). \quad (5.16)$$

Η συνάρτηση g υπολογίζεται ως εξής.

$$\begin{aligned} g(t) &= \frac{1}{2} (\mathbf{x} - t \nabla f(\mathbf{x}))^T \mathbf{P} (\mathbf{x} - t \nabla f(\mathbf{x})) + \mathbf{q}^T (\mathbf{x} - t \nabla f(\mathbf{x})) \\ &= \frac{1}{2} t^2 \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{P} \nabla f(\mathbf{x}) - t (\mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q})^T \nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} t^2 \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{P} \nabla f(\mathbf{x}) - t \|\nabla f(\mathbf{x})\|^2 + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} a t^2 - b t + c, \end{aligned} \quad (5.17)$$

με $a := \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{P} \nabla f(\mathbf{x})$, $b := \|\nabla f(\mathbf{x})\|^2$, και $c := \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x} + \mathbf{q}^T \mathbf{x}$. Η παράγωγος της g δίνεται από τη σχέση

$$\frac{dg(t)}{dt} = a t - b. \quad (5.18)$$

Η λύση της εξίσωσης $\frac{dg(t)}{dt} = 0$ είναι το

$$t_* = \frac{\mathbf{b}}{\mathbf{a}} = \frac{\|\nabla f(\mathbf{x})\|^2}{\nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{P} \nabla f(\mathbf{x})} \geq 0. \quad (5.19)$$

Άρα, στην περίπτωση αυτή, υπάρχει κλειστή λύση για το πρόβλημα αναζήτησης γραμμής.

□

5.4.3 Αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση

Σε πολλές περιπτώσεις, η λύση του προβλήματος (5.12) είναι σχετικά δύσκολο να υπολογιστεί με μεγάλη ακρίβεια.

Σε αυτές τις περιπτώσεις, μπορούμε να καταφύγουμε σε μη-ακριβείς τεχνικές αναζήτησης γραμμής (σημειώνεται ότι υπάρχουν πολλές τέτοιες τεχνικές).

Μία διαδεδομένη μη-ακριβής τεχνική αναζήτησης γραμμής είναι η **αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση** (backtracking line search).

Για κάθε $\mathbf{x} \in \text{dom} f$, η τεχνική αναζήτησης γραμμής με οπισθοχώρηση λαμβάνει ως είσοδο την κατεύθυνση καθόδου, $\Delta \mathbf{x}$, και επιστρέφει μία τιμή $t > 0$ τέτοια ώστε η τιμή $f(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x})$ να είναι “αρκετά” μικρότερη από την $f(\mathbf{x})$.

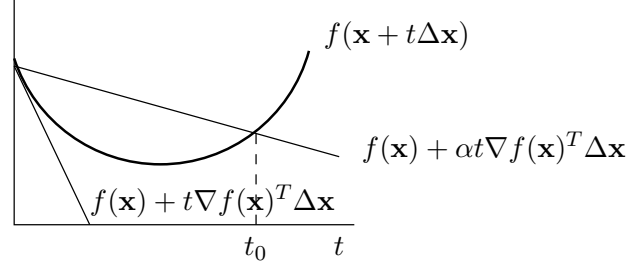
Η μέθοδος χρησιμοποιεί παραμέτρους α και β , με $0 < \alpha < 0.5$ και $0 < \beta < 1$, και περιγράφεται στον Πίνακα 5.4.3.

Αρχίζει με μοναδιαίο βήμα, δηλαδή, θέτοντας $t = 1$, το οποίο μειώνει κατά έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα β έως ότου

$$f(\mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}) + \alpha t \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}. \quad (5.20)$$

1. Μπορεί να αποδειχθεί ότι η συνθήκη (5.20) ικανοποιείται για αρκετά μικρό t , συνεπώς, ο αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής με οπισθοχώρηση τερματίζει πάντα.

Η απόδειξη βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor πρώτης τάξης και στο ότι το διάνυσμα $\Delta \mathbf{x}$ είναι κατεύθυνση καθόδου, δηλαδή, $\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x} < 0$.



Σχήμα 5.1: Αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση.

Έστω $\Delta\mathbf{x}$ κατεύθυνση καθόδου στο \mathbf{x} , $\alpha \in (0, 0.5)$, $\beta \in (0, 1)$.

$t := 1$.

While $(f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}) + \alpha t \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x})$

1. $t := \beta t$.

Πίνακας 5.2: Αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση.

Πιο συγκεκριμένα, από το ανάπτυγμα Taylor πρώτης τάξης, έχουμε ότι, για αρκετά μικρό t ,

$$f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}) + t\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x} < f(\mathbf{x}) + \alpha t \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}. \quad (5.21)$$

2. Η εκτίμηση Taylor πρώτης τάξης της μείωσης της τιμής της f ισούται με

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}) = -t\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}. \quad (5.22)$$

Συνεπώς, ο αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής με οπισθοχώρηση τερματίζει όταν η μείωση της f είναι τουλάχιστον $-\alpha t \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}$, δηλαδή, τουλάχιστον α φορές η εκτίμηση Taylor πρώτης τάξης της μείωσης (δείτε το Σχήμα 5.1).

5.5 Ανάλυση σύγκλισης για ισχυρά κυρτές συναρτήσεις

Η ανάλυση σύγκλισης μεθόδων επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι εξαιρετικά σημαντική, διότι παρέχει ένα μέτρο απόδοσης των μεθόδων, την ταχύτητα σύγκλισης.

Επιπλέον χαρακτηριστικά της μεθόδου, όπως, για παράδειγμα, η υπολογιστική πολυπλοκότητα κάθε βήματος της μεθόδου, συμπληρώνουν την εικόνα της μεθόδου.

Η ανάλυση σύγκλισης συνήθως συνοδεύεται από **υποθέσεις** σχετικά με την φύση του προβλήματος βελτιστοποίησης, για παράδειγμα, υποθέσεις σχετικά με τη διαφορισμότητα, την αυστηρή ή ισχυρή κυρτότητα της συνάρτησης κόστους, κτλ.

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τη σύγκλιση της μεθόδου βαθμίδας, υποθέτοντας ότι η συνάρτηση κόστους είναι ισχυρά κυρτή.

Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ **ισχυρά κυρτή** (strongly convex) διπλά διαφορίσιμη συνάρτηση.

Πιο συγκεκριμένα, υποθέτουμε ότι υπάρχουν $0 < m \leq M < \infty$, τέτοια ώστε

$$m\mathbf{I} \preceq \nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq M\mathbf{I}, \quad \text{για κάθε } \mathbf{x} \in \mathbb{S}, \quad (5.23)$$

όπου \mathbf{I} είναι ο $(n \times n)$ μοναδιαίος πίνακας και $\mathbb{S} := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\}$.

Στην πράξη, συνήθως, οι σταθερές m και M είναι άγνωστες.

Όμως, η υπόθεση της ύπαρξής τους επιτρέπει την **ανάλυση της σύγκλισης** (convergence analysis) του αλγορίθμου βαθμίδας και οδηγεί σε εξαιρετικά σημαντικά συμπεράσματα.

Για αυτό το λόγο, στη συνέχεια, θα υποθέσουμε την ύπαρξη αυτών των σταθερών.

Η (5.23) σημαίνει ότι, για κάθε $\mathbf{x} \in \mathbb{S}$ και $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$,

$$m\mathbf{y}^T \mathbf{I} \mathbf{y} \leq \mathbf{y}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} \leq M\mathbf{y}^T \mathbf{I} \mathbf{y}, \quad (5.24)$$

ή, ισοδύναμα,

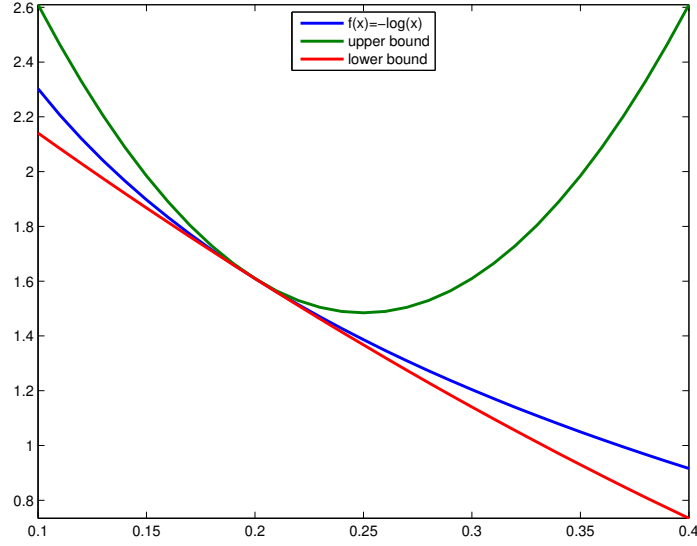
$$m\|\mathbf{y}\|_2^2 \leq \mathbf{y}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{y} \leq M\|\mathbf{y}\|_2^2. \quad (5.25)$$

Πριν συνεχίσουμε, αναφέρουμε ότι η (5.23) ισοδυναμεί με την

$$\frac{1}{M} \mathbf{I} \preceq (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \preceq \frac{1}{m} \mathbf{I}, \quad \text{για κάθε } \mathbf{x} \in \mathbb{S}. \quad (5.26)$$

Υπενθυμίζουμε ότι, για κάθε $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$,

$$f(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \nabla^2 f(\mathbf{z}) (\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (5.27)$$



Σχήμα 5.2: Τετραγωνικός ολικός υπερεκτιμητής και υποεκτιμητής της $f(x) = -\log(x)$, στο διάστημα $x \in [0.1, 0.4]$, στο σημείο $\mathbf{x}_0 = 0.2$.

για κάποιο \mathbf{z} πάνω στο ευθύγραμμο τμήμα το οποίο συνδέει τα σημεία \mathbf{x} και \mathbf{y} .

Χρησιμοποιώντας την (5.25), μπορούμε να αποδείξουμε τις ανισότητες

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{m}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 \quad (5.28)$$

και

$$f(\mathbf{y}) \leq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{M}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2, \quad (5.29)$$

οι οποίες θα φανούν εξαιρετικά χρήσιμες στη συνέχεια.

Η χρησιμότητά τους, βασικά, πηγάζει από το ότι, για δεδομένο \mathbf{x} , οι εκφράσεις στα δεξιά μέλη των (5.28) και (5.29) είναι τετραγωνικές συναρτήσεις του \mathbf{y} οι οποίες παρέχουν, αντίστοιχα, έναν ολικό υποεκτιμητή και έναν ολικό υπερεκτιμητή της f .

Μία άλλη ανισότητα η οποία θα φανεί χρήσιμη στη συνέχεια είναι η

$$p_* \geq f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2m} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2, \quad (5.30)$$

η οποία ισχύει για κάθε $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Η απόδειξη βασίζεται στην (5.28) και έχει ως εξής.

Για δεδομένο \mathbf{x} , το δεξιό μέρος της (5.28) είναι τετραγωνική συνάρτηση του \mathbf{y} , με ελάχιστη τιμή $f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2m} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2$ (να το αποδείξετε). Συνεπώς, από την (5.28), έχουμε την ανισότητα (γιατί;)

$$\min_{\mathbf{y}} f(\mathbf{y}) \geq \min_{\mathbf{y}} \left(f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{m}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2 \right), \quad (5.31)$$

η οποία συνεπάγεται την (5.30).

Μία ενδιαφέρουσα ερμηνεία της (5.30) έχει ως εξής. Αν για κάποιο $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ έχουμε ότι η τιμή $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2$ είναι “μικρή,” τότε η τιμή $f(\mathbf{x})$ είναι “κοντά” στη βέλτιστη τιμή p_* .

Αυτή η ερμηνεία προσφέρει μία συνθήκη τερματισμού του αλγορίθμου βαθμίδας, για παράδειγμα, τη συνθήκη $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 < \epsilon$, για δεδομένο “μικρό” θετικό ϵ .

Τέλος, με χρήση της (5.28), μπορεί να αποδειχθεί ότι, για κάθε $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{2}{m} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2. \quad (5.32)$$

Η απόδειξη έχει ως εξής.

Θέτοντας $\mathbf{y} = \mathbf{x}_*$ στην (5.28), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} p_* = f(\mathbf{x}_*) &\geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}) + \frac{m}{2} \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}\|_2^2 \\ &\geq f(\mathbf{x}) - \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}\|_2 + \frac{m}{2} \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}\|_2^2, \end{aligned} \quad (5.33)$$

όπου στη δεύτερη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την ανισότητα Cauchy-Schwarz. Αφού $p_* \leq f(\mathbf{x})$, έχουμε την ανισότητα

$$\frac{m}{2} \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}\|_2^2 - \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}\|_2 \leq p_* - f(\mathbf{x}) \leq 0, \quad (5.34)$$

από την οποία λαμβάνουμε την (5.32).

Η ανισότητα αυτή δηλώνει ότι αν για κάποιο \mathbf{x} έχουμε ότι η τιμή $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2$ είναι “μικρή,” τότε το \mathbf{x} αυτό είναι “κοντά” στο βέλτιστο σημείο \mathbf{x}_* .

Συνεπώς, έχουμε άλλο ένα επιχείρημα για να χρησιμοποιήσουμε ως κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου βαθμίδας την ποσότητα $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2$.

Κατά τη διάρκεια της ανάλυσης και για απλούστευση συμβολισμού, θα χρησιμοποιήσουμε την έκφραση $\mathbf{x}_+ = \mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}$ αντί για την έκφραση $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t_k\Delta\mathbf{x}_k$.

5.5.1 Ακριβής αναζήτηση γραμμής

Σε αυτό το εδάφιο, θα μελετήσουμε την ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου βαθμίδας με ακριβή αναζήτηση γραμμής.

Ορίζουμε την $\tilde{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, με $\tilde{f}(t) = f(\mathbf{x} - t\nabla f(\mathbf{x}))$.

Από την (5.29), για $\mathbf{y} = \mathbf{x} - t\nabla f(\mathbf{x})$, λαμβάνουμε

$$\tilde{f}(t) \leq f(\mathbf{x}) - t\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 + \frac{Mt^2}{2}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2. \quad (5.35)$$

Στη συνέχεια, εφαρμόζουμε ακριβή αναζήτηση γραμμής και ελαχιστοποιούμε ως προς το t και τα δύο μέλη της (5.35).

Η βέλτιστη τιμή του αριστερού μέλους ισούται με $\tilde{f}(t_{\text{exact}})$.

Το δεξιό μέλος είναι μία τετραγωνική συνάρτηση του t , η οποία ελαχιστοποιείται για $t = \frac{1}{M}$, και έχει ελάχιστη τιμή ίση με $f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2$ (να το αποδείξετε). Συνεπώς,

$$f(\mathbf{x}_+) := \tilde{f}(t_{\text{exact}}) \leq f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2. \quad (5.36)$$

Αφαιρώντας το p_* από τα δύο μέλη, λαμβάνουμε ότι

$$f(\mathbf{x}_+) - p_* \leq f(\mathbf{x}) - p_* - \frac{1}{2M}\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2. \quad (5.37)$$

Από την (5.30), λαμβάνουμε ότι

$$\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \geq 2m(f(\mathbf{x}) - p_*). \quad (5.38)$$

Συνδυάζοντας τις (5.37) και (5.38), λαμβάνουμε ότι

$$f(\mathbf{x}_+) - p_* \leq \left(1 - \frac{m}{M}\right)(f(\mathbf{x}) - p_*). \quad (5.39)$$

Ορίζοντας $c := 1 - \frac{m}{M}$ και εφαρμόζοντας την παραπάνω ανισότητα αναδρομικά, λαμβάνουμε ότι

$$f(\mathbf{x}_k) - p_* \leq c^k(f(\mathbf{x}_0) - p_*). \quad (5.40)$$

Παρατηρούμε ότι $0 \leq c < 1$. Συνεπώς, η παραπάνω σχέση αποδεικνύει ότι $f(\mathbf{x}_k) \rightarrow p_*$, όταν $k \rightarrow \infty$.

Ειδικότερα, για να υπολογίσουμε μία ικανή συνθήκη, η οποία να εξασφαλίζει ότι έχουμε επιτύχει ακρίβεια $\epsilon > 0$, δουλεύουμε ως εξής.

Έστω

$$c^k(f(\mathbf{x}_0) - p_*) \leq \epsilon. \quad (5.41)$$

Τότε

$$\begin{aligned} \frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\epsilon} &\leq \frac{1}{c^k} = \left(\frac{1}{c}\right)^k \\ \iff \log\left(\frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\epsilon}\right) &\leq k \log\left(\frac{1}{c}\right) \\ \iff k &\geq \frac{\log\left(\frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\epsilon}\right)}{\log\left(\frac{1}{c}\right)}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν την (5.40), συμπεραίνουμε ότι αν

$$k \geq k_\epsilon := \frac{\log\left(\frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\epsilon}\right)}{\log\left(\frac{1}{c}\right)}, \quad (5.43)$$

τότε $f(\mathbf{x}_k) - p_* \leq \epsilon$.

Ορίζουμε ως **αριθμό συνθήκης** (condition number) του προβλήματος την ποσότητα

$$\mathcal{K} := \frac{M}{m}. \quad (5.44)$$

Για μεγάλο \mathcal{K} , έχουμε ότι¹

$$\log\left(\frac{1}{c}\right) = -\log\left(1 - \frac{m}{M}\right) \approx \frac{m}{M} = \frac{1}{\mathcal{K}}. \quad (5.45)$$

Σε αυτή την περίπτωση,

$$k_\epsilon \approx \mathcal{K} \log\left(\frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\epsilon}\right), \quad (5.46)$$

δηλαδή, ο μέγιστος απαιτούμενος αριθμός επαναλήψεων για να πλησιάσουμε ϵ -κοντά στη βέλτιστη τιμή p_* αυξάνεται γραμμικά με τον αριθμό συνθήκης του προβλήματος.

Επιπλέον, εξαρτάται λογαριθμικά από το αρχικό σημείο \mathbf{x}_0 και από την “ακρίβεια” ϵ .

Μία άλλη ερμηνεία της (5.46) είναι η εξής: για να αυξήσουμε την ακρίβεια της λύσης ϵ κατά ένα δεκαδικό ψηφίο θα πρέπει να εκτελέσουμε επιπλέον (το πολύ) $O(1)\mathcal{K}$ επαναλήψεις (γιατί;).

¹Θυμηθείτε ότι $\log(1 - x) = -x + O(x^2)$.

5.5.2 Αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση

Χρησιμοποιώντας αντίστοιχα επιχειρήματα, μπορεί να αποδειχθεί ότι για τη μέθοδο αναζήτησης με οπισθοχώρηση ισχύει ότι

$$f(\mathbf{x}_k) - p_* \leq c^k (f(\mathbf{x}_0) - p_*), \quad (5.47)$$

με $c := 1 - \min \{2m\alpha, \frac{2\beta\alpha m}{M}\} < 1$ (να μελετήσετε το αντίστοιχο εδάφιο του βιβλίου B&V). Συνεπώς, η ακολουθία σημείων \mathbf{x}_k , η οποία παράγεται από τη μέθοδο βαθμίδας με αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση, συγκλίνει στη βέλτιστη λύση \mathbf{x}_* .

5.5.3 Γραμμική ταχύτητα σύγκλισης

Στα προηγούμενα εδάφια, αποδείξαμε ότι, για τη μέθοδο βαθμίδας, με ακριβή αναζήτηση γραμμής ή με αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση, έχουμε ότι

$$\frac{f(\mathbf{x}_{k+1}) - p_*}{f(\mathbf{x}_k) - p_*} \leq c \quad (5.48)$$

με $0 \leq c < 1$. Ακολουθίες οι οποίες συμπεριφέρονται όπως η $f(\mathbf{x}_k)$ λέμε ότι συγκλίνουν γεωμετρικά ή γραμμικά.

5.5.4 Μία άλλη ερμηνεία της μεθόδου gradient descent

Έστω ότι ευρισκόμαστε στο σημείο \mathbf{x}_k . Η δεύτερης τάξης προσέγγιση της f γύρω από το σημείο αυτό έχει ως εξής:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)^T \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k). \quad (5.49)$$

Αν στην παραπάνω σχέση, αντί για την Εσσιανή $\nabla^2 f(\mathbf{x}_k)$ θέσουμε τον πίνακα $\frac{1}{t} \mathbf{I}$, τότε λαμβάνουμε

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2t} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2 =: g(\mathbf{x}). \quad (5.50)$$

Η $g(\mathbf{x})$ είναι τετραγωνική κυρτή συνάρτηση του \mathbf{x} , με παράγωγο

$$\nabla g(\mathbf{x}) = \frac{1}{t} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (5.51)$$

$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, $k = 0$.

While (stopping criterion is FALSE)

1. Compute $\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}}$.
 2. Line search and choose t_k .
 3. $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t_k \Delta \mathbf{x}_{\text{sd}}$.
 4. $k := k + 1$.
-

Πίνακας 5.3: Αλγόριθμος πιο απότομης καθόδου.

Το σημείο το οποίο την ελαχιστοποιεί είναι το

$$\mathbf{x}_* = \mathbf{x}_k - t \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (5.52)$$

Συνεπώς, η επανάληψη της μεθόδου gradient descent στο σημείο \mathbf{x}_k μπορεί να ερμηνευθεί ως βελτιστοποίηση μίας απλοϊκής τετραγωνικής προσέγγισης της f γύρω από το σημείο \mathbf{x}_k .

Όσο μικρότερο είναι το t , τόσο μεγαλύτερη είναι η συνεισφορά του όρου δεύτερης τάξης, το οποίο σημαίνει ότι το βέλτιστο σημείο θα είναι κοντά στο \mathbf{x}_k .

5.6 Μέθοδος πιο-απότομης καθόδου

Ορισμός 5.6.1. Έστω $\|\cdot\|$ μέτρο στον \mathbb{R}^n . Ως **κατεύθυνση πιο απότομης καθόδου** (steepest descent direction) της f στο σημείο \mathbf{x} ορίζουμε το διάνυσμα

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = \underset{\mathbf{v}, \|\mathbf{v}\|=1}{\operatorname{argmin}} \{ \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{v} \}. \quad (5.53)$$

Βασιζόμενοι στον ορισμό 5.6.1, αναπτύσσουμε τον αλγόριθμο πιο απότομης καθόδου, ο οποίος περιγράφεται στον Πίνακα 5.3.

5.7 Ευκλείδειο μέτρο

Αν $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$, τότε ο αλγόριθμος πιο απότομης καθόδου ταυτίζεται με τον αλγόριθμο βαθμίδας, δηλαδή

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = -\nabla f(\mathbf{x}). \quad (5.54)$$

5.8 Τετραγωνικά μέτρα

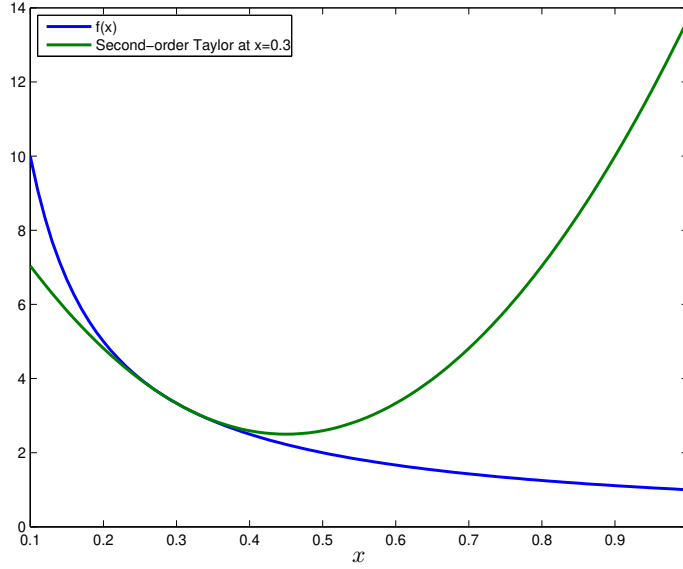
Αν $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{P}} = (\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{x})^{\frac{1}{2}}$, για $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T \succeq \mathbf{O}$, τότε έχουμε ότι, στο σημείο \mathbf{x} ,

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{sd}} = -\mathbf{P}^{-1} \nabla f(\mathbf{x}). \quad (5.55)$$

5.8.1 Ερμηνεία μέσω αλλαγής συντεταγμένων

5.9 Ανάλυση σύγκλισης

Χρησιμοποιώντας επιχειρήματα αντίστοιχα με αυτά της παραγράφου **, μπορεί να αποδειχθεί ότι ...



Σχήμα 5.3: Συνάρτηση $f(x) = x^{-1}$ και δεύτερης τάξης προσέγγιση Taylor στο σημείο $x = 0.3$.

5.10 Μέθοδος Newton

Στη συνέχεια, περιγράφουμε μία εξαιρετικά σημαντική μέθοδο επίλυσης συστημάτων μη-γραμμικών εξισώσεων και προβλημάτων βελτιστοποίησης, τη μέθοδο Newton.

5.11 Βήμα Newton

Η κατεύθυνση κίνησης

$$\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = - (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \quad (5.56)$$

καλείται **βήμα Newton** (Newton step).

Αν $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succ \mathbf{0}$, τότε

$$\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = -\nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \leq 0, \quad (5.57)$$

με ισότητα αν, και μόνο αν, $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Άρα, το βήμα Newton είναι κατεύθυνση καθόδου της f στο σημείο \mathbf{x} .

Το βήμα Newton μπορεί να ερμηνευτεί ως εξής.

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\epsilon > 0$.

While (TRUE)

1. $\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} := -(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x})$.
 2. $\lambda^2 := \nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x})$.
 3. **quit** if $\frac{\lambda^2}{2} \leq \epsilon$.
 4. Perform backtracking line search and choose t .
 5. $\mathbf{x} := \mathbf{x} + t\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}$.
-

Πίνακας 5.4: Αλγόριθμος Newton.

1. *Ελαχιστοποίηση προσέγγισης δεύτερης τάξης.* Η προσέγγιση Taylor δεύτερης τάξης της f στο σημείο \mathbf{x} δίνεται από τη σχέση

$$\hat{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) (\mathbf{y} - \mathbf{x}). \quad (5.58)$$

Αυτή η τετραγωνική συνάρτηση ελαχιστοποιείται για $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}$ (δείτε το Σχήμα 5.3).

2. *Μέθοδος πιο απότομης καθόδου, ως προς τη νόρμα της Εσσιανής.* Το βήμα Newton είναι η κατεύθυνση πιο απότομης καθόδου της f στο \mathbf{x} για μέτρο

$$\|\mathbf{u}\|_{\nabla^2 f(\mathbf{x})} = (\mathbf{u}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{u})^{\frac{1}{2}}. \quad (5.59)$$

3. *Λύση γραμμικοποιημένης συνθήκης βελτιστότητας.* Η γραμμική προσέγγιση της εξίσωσης $\nabla f(\mathbf{x}_*) = \mathbf{0}$ στην περιοχή του \mathbf{x} δίνει

$$\nabla f(\mathbf{x} + \mathbf{v}) \approx \nabla f(\mathbf{x}) + \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{v} = \mathbf{0}, \quad (5.60)$$

η οποία δίνει $\mathbf{v} = -(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x})$.

5.12 Μείωση Newton

Η ποσότητα

$$\lambda(\mathbf{x}) := \left(\nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.61)$$

καλείται **μείωση Newton** (Newton decrement). Παίζει σημαντικό ρόλο στην ανάλυση της μεθόδου Newton και χρησιμοποιείται στον έλεγχο τερματισμού του αλγορίθμου.

Αν $\hat{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$ είναι η δεύτερης τάξης προσέγγιση της f , στο σημείο \mathbf{x} , δηλαδή,

$$\hat{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) (\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (5.62)$$

τότε

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) - \inf_{\mathbf{y}} \hat{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}) &= f(\mathbf{x}) - \hat{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) \\ &= -\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} - \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} \\ &= \nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \\ &= \frac{1}{2} \lambda^2(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (5.63)$$

Δηλαδή, η ποσότητα $\frac{\lambda^2(\mathbf{x})}{2}$ είναι μία εκτίμηση για την ποσότητα $f(\mathbf{x}) - p_*$ βασιζόμενη στην τετραγωνική προσέγγιση της f στο σημείο \mathbf{x} .

Επιπλέον, η μείωση Newton εμφανίζεται στην αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση διότι

$$-\lambda^2(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = \left. \frac{d}{dt} f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) \right|_{t=0}. \quad (5.64)$$

5.13 Αλγόριθμος Newton

Στον Πίνακα 5.4, παραθέτουμε τον αλγόριθμο Newton.

5.13.1 Αφφινική αμεταβλητότητα βήματος Newton

Έστω $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και $\tilde{f}(\mathbf{y}) = f(\mathbf{T}\mathbf{y})$. Τότε, για $\mathbf{x} = \mathbf{T}\mathbf{y}$,

$$\nabla \tilde{f}(\mathbf{y}) = \mathbf{T}^T \nabla f(\mathbf{x}), \nabla^2 \tilde{f}(\mathbf{y}) = \mathbf{T}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{T}, \quad (5.65)$$

Το βήμα Newton για την \tilde{f} στο \mathbf{y} ισούται με

$$\Delta \mathbf{y}_{\text{Nt}} = \cdots = \mathbf{T}^{-1} \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} \quad (5.66)$$

όπου $\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}$ είναι το βήμα Newton της f στο \mathbf{x} . Συνεπώς,

$$\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} = \mathbf{T}(\mathbf{y} + \Delta \mathbf{y}_{\text{Nt}}). \quad (5.67)$$

5.14 Τοπική σύγκλιση αλγορίθμου Newton

Σε αυτό το εδάφιο, θα μελετήσουμε τη σύγκλιση του αλγορίθμου Newton υποθέτοντας ότι εκκινεί από σημείο το οποίο ευρίσκεται αρκετά κοντά στο βέλτιστο σημείο.

Το αποτέλεσμα το οποίο θα αποδείξουμε υποδεικνύει ότι, τοπικά, ο αλγόριθμος Newton έχει τετραγωνική σύγκλιση.

Στην πράξη, αυτό σημαίνει ότι, αν εκκινήσουμε από ένα σημείο το οποίο ευρίσκεται αρκετά κοντά στη λύση, τότε το πλήθος των ψηφίων ακρίβειας της λύσης διπλασιάζεται σε κάθε επανάληψη.

Μία πλήρης ανάλυση της σύγκλισης του αλγορίθμου Newton δίδεται στο Παράρτημα του Κεφαλαίου.

5.14.1 Τεχνικό υπόβαθρο

Πριν προχωρήσουμε στην ανάλυση του αλγορίθμου Newton, εισάγουμε κάποιο συμβολισμό τον οποίο θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια.

Έστω $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_n) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Ορίζουμε

$$\int_a^b \mathbf{g}(t) dt := \begin{bmatrix} \int_a^b g_1(t) dt \\ \vdots \\ \int_a^b g_n(t) dt \end{bmatrix}. \quad (5.68)$$

Αν $\mathbf{A} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$, τότε ορίζουμε

$$\int_a^b \mathbf{A}(t) \mathbf{g}(t) dt := \begin{bmatrix} \int_a^b \mathbf{a}_1^T(t) \mathbf{g}(t) dt \\ \vdots \\ \int_a^b \mathbf{a}_m^T(t) \mathbf{g}(t) dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \int_a^b a_{1,i}(t) g_i(t) dt \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n \int_a^b a_{m,i}(t) g_i(t) dt \end{bmatrix}. \quad (5.69)$$

Επιπλέον, παρατηρήστε ότι μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbf{c} = \int_0^1 \mathbf{c} dt, \quad \mathbf{A} \mathbf{c} = \int_0^1 \mathbf{A} \mathbf{c} dt. \quad (5.70)$$

Ορίζουμε τη νόρμα

$$\left\| \int_a^b \mathbf{g}(t) dt \right\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\int_a^b g_i(t) dt \right)^2}. \quad (5.71)$$

Μπορούν να αποδειχθούν οι ανισότητες, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια,

$$\left\| \int_a^b \mathbf{A}(t) \mathbf{g}(t) dt \right\|_2 \leq \int_a^b \|\mathbf{A}(t) \mathbf{g}(t)\|_2 dt \leq \int_a^b \|\mathbf{A}(t)\|_2 \|\mathbf{g}(t)\|_2 dt. \quad (5.72)$$

Η αριστερή ανισότητα είναι γενίκευση της τριγωνικής ανισότητας, ενώ η δεξιά ανισότητα προκύπτει από εφαρμογή της σχέσης

$$\|\mathbf{A} \mathbf{g}\|_2 \leq \|\mathbf{A}\|_2 \|\mathbf{g}\|_2, \quad \text{για } \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{g} \in \mathbb{R}^n. \quad (5.73)$$

Σε αυτό το σημείο, έχουμε στη διάθεσή μας όλα τα τεχνικά εργαλεία για να προχωρήσουμε στην ανάλυση σύγκλισης του αλγορίθμου Newton.

Θεώρημα 5.14.1. Έστω $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ διπλά συνεχώς διαφορίσιμη. Έστω ότι

1. $\exists m > 0$ τέτοιο ώστε $\nabla^2 f(\mathbf{x}) \succeq m \mathbf{I}$, για κάθε $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Παρατηρήστε ότι αυτή η υπόθεση οδηγεί στην ανισότητα

$$(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \preceq \frac{1}{m} \mathbf{I}, \quad \text{για κάθε } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

2. $\exists L > 0$ τέτοιο ώστε $\|\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{y})\|_2 \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$, για κάθε $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$.

Έστω $\{\mathbf{x}_k\}$ η ακολουθία που παράγεται από τη μέθοδο Newton και \mathbf{x}_* το βέλτιστο σημείο. Τότε, για $k = 0, 1, \dots$, ισχύει η ανισότητα

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{L}{2m} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2^2. \quad (5.74)$$

Επιπλέον, αν $\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{m}{L}$, τότε, για $k = 0, 1, \dots$, έχουμε ότι

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{2m}{L} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^k}. \quad (5.75)$$

Απόδειξη. Μελετούμε τον αλγόριθμο με $t_k = 1$. Από τον ορισμό του αλγορίθμου, έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_* &= \mathbf{x}_k - (\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_* \\ &\stackrel{\nabla f(\mathbf{x}_*)=0}{=} \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_* + (\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1} (\nabla f(\mathbf{x}_*) - \nabla f(\mathbf{x}_k)) \\ &\stackrel{(!)}{=} \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_* + (\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1} \int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) dt \\ &= (\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1} \int_0^1 [\nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) - \nabla^2 f(\mathbf{x}_k)] (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) dt, \end{aligned} \quad (5.76)$$

όπου στο σημείο (!) δουλέψαμε ως εξής. Ορίζουμε τη συνάρτηση $\mathbf{g} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, με

$$\mathbf{g}(t) = \nabla f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)).$$

Αν $D\mathbf{g}$ είναι η παράγωγος της \mathbf{g} (παρατηρήστε ότι $D\mathbf{g} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$), τότε

$$\mathbf{g}(1) - \mathbf{g}(0) = \int_0^1 D\mathbf{g}(t) dt. \quad (5.77)$$

Χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} D\mathbf{g}(t) &= D\nabla f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) \\ &= \nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) D(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) \\ &= \nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k). \end{aligned} \quad (5.78)$$

Συνεπώς, η (5.77) γράφεται ως

$$\nabla f(\mathbf{x}_*) - \nabla f(\mathbf{x}_k) = \int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) dt. \quad (5.79)$$

Η σχέση αυτή χρησιμοποιήθηκε στο σημείο (!).

Από την (5.76), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned}
& \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_*\|_2 \\
& \leq \|(\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1}\|_2 \\
& \quad \left\| \int_0^1 [\nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) - \nabla^2 f(\mathbf{x}_k)] (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) dt \right\|_2 \\
& \leq \|(\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1}\|_2 \\
& \quad \int_0^1 \left\| [\nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) - \nabla^2 f(\mathbf{x}_k)] (\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k) \right\|_2 dt \\
& \leq \|(\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1}\|_2 \\
& \quad \int_0^1 \left\| \nabla^2 f(\mathbf{x}_k + t(\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k)) - \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) \right\|_2 \|\mathbf{x}_* - \mathbf{x}_k\|_2 dt \\
& \stackrel{(*)}{\leq} \frac{1}{m} \int_0^1 Lt \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2^2 dt \\
& = \frac{L}{2m} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2^2,
\end{aligned}$$

όπου στο σημείο (*) χρησιμοποιήσαμε τις δύο υποθέσεις. Το πρώτο σκέλος του θεωρήματος αποδείχθηκε.

Το δεύτερο σκέλος αποδεικνύεται μέσω επαγωγής. Για $k = 0$, υποθέσαμε ότι

$$\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{m}{L} = \frac{2m}{L} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^0}. \quad (5.80)$$

Έστω ότι η υπόθεση ισχύει για κάποιο k , δηλαδή,

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2 \leq \frac{2m}{L} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^k}. \quad (5.81)$$

Θα αποδείξουμε ότι ισχύει για $k + 1$. Από το πρώτο μέρος του θεωρήματος, έχουμε ότι

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_*\|_2 & \leq \frac{L}{2m} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_*\|_2^2 \\
& \leq \frac{L}{2m} \left(\frac{2m}{L} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^k} \right)^2 \\
& = \frac{2m}{L} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{k+1}},
\end{aligned} \quad (5.82)$$

ολοκληρώνοντας την απόδειξη. □

Παράρτημα I

5.15 Ανάλυση σύγκλισης αλγορίθμου Newton

Υποθέτουμε ότι η f είναι αυστηρά κυρτή. Πιο συγκεκριμένα, υποθέτουμε ότι υπάρχουν $0 < m \leq M$ τέτοια ώστε, για κάθε $\mathbf{x} \in \mathbb{S}$,

$$m\mathbf{I} \preceq \nabla^2 f(\mathbf{x}) \preceq M\mathbf{I}. \quad (5.83)$$

Επιπλέον, υποθέτουμε ότι η $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ είναι Lipschitz συνεχής στο \mathbb{S} με σταθερά L , δηλαδή, υπάρχει $L > 0$ τέτοιο ώστε, για κάθε $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{S}$, έχουμε ότι

$$\|\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{y})\|_2 \leq L\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2. \quad (5.84)$$

Η σταθερά L στη σχέση (5.84) μπορεί να ερμηνευθεί ως ένα φράγμα για το μέγεθος της τρίτης παραγώγου της f για $\mathbf{x} \in \mathbb{S}$ (αν η f είναι τετραγωνική συνάρτηση, τότε $L = 0$). Γενικότερα, η ποσότητα L είναι ένα μέτρο της ποιότητας προσέγγισης της συνάρτησης f από μία τετραγωνική συνάρτηση. Διαισθητικά, αναμένουμε ότι, όσο μικρότερο είναι το L , τόσο καλύτερη θα είναι η προσέγγιση της f από μία τετραγωνική συνάρτηση. Γνωρίζουμε ότι η μέθοδος Newton επιλύει τετραγωνικά προβλήματα σε μία επανάληψη. Συνεπώς, αναμένουμε ότι η συμπεριφορά του αλγορίθμου Newton θα είναι “πολύ καλή” στις περιπτώσεις στις οποίες η τιμή του L είναι “μικρή” και “λιγότερο καλή” στις περιπτώσεις στις οποίες η τιμή του L είναι “μεγάλη.”

5.15.1 Σύντομη περιγραφή αποτελεσμάτων

Όπως θα αποδείξουμε στη συνέχεια, η συμπεριφορά του αλγορίθμου Newton, γενικά, χωρίζεται σε δύο φάσεις. Κατά την πρώτη φάση, η οποία καλείται damped Newton phase, διότι η αναζήτηση γραμμής (με οπισθοχώρηση) μπορεί να επιστρέψει $t < 1$, η σύγκλιση είναι “αργή.” Κατά τη δεύτερη φάση, η οποία καλείται pure Newton phase, διότι η αναζήτηση γραμμής (με οπισθοχώρηση) επιστρέφει $t = 1$, η σύγκλιση είναι “γρήγορη.”

Πιο συγκεκριμένα, θα αποδείξουμε ότι υπάρχουν πραγματικοί αριθμοί η και γ , με $0 < \eta \leq \frac{m^2}{L}$ και $\gamma > 0$, τέτοιοι ώστε:

1. Φάση I: Αν $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 \geq \eta$, τότε

$$f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k) \leq -\gamma. \quad (5.85)$$

2. Φάση II: Αν $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 < \eta$, τότε

(α') ο αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής με οπισθοχώρηση επιστρέφει $t_k = 1$,

(β') ισχύουν οι ανισότητες

$$\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 < \frac{1}{2}, \quad (5.86)$$

$$\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 \right)^2. \quad (5.87)$$

Ας δούμε τις συνέπειες των παραπάνω προτάσεων.

1. Ένα άνω φράγμα για το πλήθος των επαναλήψεων της Φάσης I εξάγεται ως εξής. Αφού η f μειώνεται τουλάχιστον κατά γ σε κάθε επανάληψη, το πλήθος των απαιτούμενων επαναλήψεων δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερο από

$$n_{\text{damped}} := \frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\gamma}, \quad (5.88)$$

διότι, αν ήταν μεγαλύτερο, τότε, για κάποιο $k > n_{\text{damped}}$, θα είχαμε $f(\mathbf{x}_k) < p_*$, το οποίο είναι αδύνατο να συμβεί.

2. Ένα άνω φράγμα για το πλήθος των επαναλήψεων της Φάσης II εξάγεται ως εξής. Έστω k τέτοιο ώστε $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 < \eta$. Τότε, από την (5.87) και το ότι $\eta \leq \frac{m^2}{L}$, έχουμε ότι

$$\|\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})\|_2 < \frac{L}{2m^2} \eta^2 \leq \frac{L}{2m^2} \frac{m^2}{L} \eta = \frac{1}{2} \eta < \eta. \quad (5.89)$$

Συνεχίζοντας αναδρομικά, διαπιστώνουμε ότι $\|\nabla f(\mathbf{x}_l)\|_2 < \eta$, για κάθε $l \geq k$. Επιπλέον, εφαρμόζοντας αναδρομικά την (5.87) και χρησιμοποιώντας την (5.86), λαμβάνουμε ότι

$$\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}_l)\|_2 \leq \left(\frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 \right)^{2^{l-k}} \leq \left(\frac{1}{2} \right)^{2^{l-k}}, \quad (5.90)$$

από το οποίο συνεπάγεται ότι

$$\|\nabla f(\mathbf{x}_l)\|_2^2 \leq \frac{4m^4}{L^2} \left(\frac{1}{2} \right)^{2^{l-k+1}}. \quad (5.91)$$

Χρησιμοποιώντας αρχικά την (5.30) και κατόπιν την (5.91), λαμβάνουμε ότι

$$f(\mathbf{x}_l) - p_* \leq \frac{1}{2m} \|\nabla f(\mathbf{x}_l)\|_2^2 \leq \frac{2m^3}{L^2} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{l-k+1}}. \quad (5.92)$$

Θέτοντας $\epsilon_0 := \frac{2m^3}{L^2}$ και λύνοντας την ανισότητα

$$\frac{2m^3}{L^2} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{l-k+1}} \leq \epsilon, \quad (5.93)$$

ως προς το πλήθος των επαναλήψεων της Φάσης II, $n_{\text{pure}} := l - k + 1$, έχουμε

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{l-k+1}} &\leq \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \\ \iff 2^{2^{l-k+1}} &\geq \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \\ \iff l - k + 1 &\geq \log_2 \left(\log_2 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \right). \end{aligned} \quad (5.94)$$

Συνδυάζοντας τις (5.92), (5.93), και (5.94), λαμβάνουμε ότι $f(\mathbf{x}) - p_* \leq \epsilon$ μετά από το πολύ

$$n_{\text{pure}} := \log_2 \left(\log_2 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \right) \quad (5.95)$$

επαναλήψεις της Φάσης II. **Κατά τη διάρκεια της Φάσης II, ο αλγόριθμος συγκλίνει τετραγωνικά. Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι, σε κάθε επανάληψη, το πλήθος των κοινών ψηφίων των $f(\mathbf{x}_k)$ και p_* διπλασιάζεται.**

Άρα, συνολικά, για να επιτύχουμε $f(\mathbf{x}_k) - p_* \leq \epsilon$ απαιτούνται το πολύ

$$n_{\text{Newton}} = n_{\text{damped}} + n_{\text{pure}} \quad (5.96)$$

επαναλήψεις. Η συνάρτηση $\log_2(\log_2(x))$ αυξάνεται εξαιρετικά αργά με το x , συνεπώς, πρακτικά, μπορούμε να πούμε ότι ο όρος $\log_2(\log_2(\frac{\epsilon_0}{\epsilon}))$ φράσσεται από πάνω από μία σταθερά, για παράδειγμα, από τον αριθμό πέντε ή έξι.

Συνεπώς, μπορούμε να πούμε ότι επιτυγχάνουμε μία πολύ καλή προσέγγιση της λύσης με το πολύ

$$n_{\text{Newton}} = \frac{f(\mathbf{x}_0) - p_*}{\gamma} + 6 \quad (5.97)$$

επαναλήψεις του αλγορίθμου Newton.

5.15.2 Ανάλυση σύγκλισης αλγορίθμου Newton: Φάση I

Στη συνέχεια, αποδεικνύουμε λεπτομερώς την (5.85). Από το ανάπτυγμα Taylor δεύτερης τάξης και την υπόθεση (5.83), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{Nt}) &\leq f(\mathbf{x}) + t\nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}_{Nt} + \frac{M\|\Delta\mathbf{x}_{Nt}\|_2^2}{2} t^2 \\ &\leq f(\mathbf{x}) - t\lambda^2(\mathbf{x}) + \frac{M}{2m} t^2 \lambda^2(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (5.98)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την (5.64) και το ότι

$$\lambda^2(\mathbf{x}) = \Delta\mathbf{x}_{Nt}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta\mathbf{x}_{Nt} \geq m\|\Delta\mathbf{x}_{Nt}\|_2^2. \quad (5.99)$$

Το βήμα $\hat{t} := \frac{m}{M}$ ικανοποιεί τη συνθήκη εξόδου από την αναζήτηση γραμμής (υπενθυμίζουμε ότι $\alpha < \frac{1}{2}$) διότι, θέτοντας $t = \hat{t}$ στην (5.98), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x} + \hat{t}\Delta\mathbf{x}_{Nt}) &\leq f(\mathbf{x}) - \hat{t}\lambda^2(\mathbf{x}) + \frac{M}{2m} \hat{t}^2 \lambda^2(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) - \frac{m}{2M} \lambda^2(\mathbf{x}) \\ &\leq f(\mathbf{x}) - \alpha \hat{t} \lambda^2(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \alpha \hat{t} \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}_{Nt}. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Συνεπώς, η αναζήτηση γραμμής επιστρέφει βήμα $t \geq \frac{\beta m}{M}$ το οποίο οδηγεί σε

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_+) - f(\mathbf{x}) &\leq -\alpha t \lambda^2(\mathbf{x}) \\ &\leq -\alpha \beta \frac{m}{M} \lambda^2(\mathbf{x}) \\ &\leq -\alpha \beta \frac{m}{M^2} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \\ &\leq -\alpha \beta \eta^2 \frac{m}{M^2} \end{aligned} \quad (5.101)$$

όπου, στην τρίτη γραμμή, χρησιμοποιήσαμε την ανισότητα

$$\lambda^2(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \geq \frac{1}{M} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2, \quad (5.102)$$

και στην τέταρτη γραμμή την υπόθεση $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \geq \eta$. Άρα, η (5.85) ισχύει με

$$\gamma := \alpha \beta \eta^2 \frac{m}{M^2}. \quad (5.103)$$

5.15.3 Ανάλυση σύγκλισης αλγορίθμου Newton: Φάση II

Αρχικά, αποδεικνύουμε ότι αν $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 < \eta$, με

$$\eta \leq 3(1 - 2\alpha)\frac{m^2}{L}, \quad (5.104)$$

τότε η αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση επιστρέφει $t = 1$.

Αν $t \geq 0$, από την υπόθεση Lipschitz, λαμβάνουμε

$$\|\nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})\|_2 \leq tL\|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2, \quad (5.105)$$

και, συνεπώς,²

$$|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}^T (\nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})) \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}| \leq tL\|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2^3. \quad (5.106)$$

Εφαρμόζοντας (δύο φορές) τον κανόνα αλυσίδας στη συνάρτηση $\tilde{f}(t) := f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}})$, λαμβάνουμε ότι

$$D^2 \tilde{f}(t) = \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}^T \nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}) \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}, \quad (5.107)$$

συνεπώς, η (5.106) γράφεται ως

$$|D^2 \tilde{f}(t) - D^2 \tilde{f}(0)| \leq tL\|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2^3. \quad (5.108)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε αυτή την ανισότητα για να βρούμε ένα άνω φράγμα για την $\tilde{f}(t)$. Αρχικά, από την (5.108), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} D^2 \tilde{f}(t) &\leq D^2 \tilde{f}(0) + tL\|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2^3 \\ &\leq \lambda^2(\mathbf{x}) + t\frac{L}{m^{\frac{3}{2}}}\lambda^3(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (5.109)$$

όπου στη δεύτερη γραμμή χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις $D^2 \tilde{f}(0) = \lambda^2(\mathbf{x})$ και $\lambda^2(\mathbf{x}) \geq m\|\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2^2$. Ολοκληρώνοντας την τελευταία ανισότητα, λαμβάνουμε

$$\int_0^t D^2 \tilde{f}(s) ds \leq \int_0^t \left(\lambda^2(\mathbf{x}) + s\frac{L}{m^{\frac{3}{2}}}\lambda^3(\mathbf{x}) \right) ds, \quad (5.110)$$

το οποίο συνεπάγεται ότι

$$\begin{aligned} D\tilde{f}(t) &\leq D\tilde{f}(0) + t\lambda^2(\mathbf{x}) + t^2\frac{L}{2m^{\frac{3}{2}}}\lambda^3(\mathbf{x}) \\ &= -\lambda^2(\mathbf{x}) + t\lambda^2(\mathbf{x}) + t^2\frac{L}{2m^{\frac{3}{2}}}\lambda^3(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (5.111)$$

²Θυμίζουμε ότι $|\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x}| = \|\mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x}\|_2 \leq \|\mathbf{y}\|_2 \|\mathbf{A}\|_2 \|\mathbf{x}\|_2$.

όπου στη δεύτερη γραμμή χρησιμοποιήσαμε τη σχέση $D\tilde{f}(0) = -\lambda^2(\mathbf{x})$. Ολοκληρώνοντας για μία ακόμα φορά, λαμβάνουμε

$$\int_0^t D\tilde{f}(s)ds \leq \int_0^t \left(-\lambda^2(\mathbf{x}) + s\lambda^2(\mathbf{x}) + s^2 \frac{L}{2m^{\frac{3}{2}}} \lambda^3(\mathbf{x}) \right) ds, \quad (5.112)$$

το οποίο συνεπάγεται ότι

$$\tilde{f}(t) \leq \tilde{f}(0) - t\lambda^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}t^2\lambda^2(\mathbf{x}) + t^3 \frac{L}{6m^{\frac{3}{2}}} \lambda^3(\mathbf{x}). \quad (5.113)$$

Θέτοντας $t = 1$, λαμβάνουμε

$$f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}) \leq f(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\lambda^2(\mathbf{x}) + \frac{L}{6m^{\frac{3}{2}}} \lambda^3(\mathbf{x}). \quad (5.114)$$

Ας υποθέσουμε ότι $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \leq \eta \leq 3(1 - 2\alpha)\frac{m^2}{L}$. Εξαιτίας της αυστηρής κυρτότητας της f , έχουμε

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{x}) &= \left(\nabla f(\mathbf{x})^T (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \left(\frac{1}{m} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{m^{\frac{1}{2}}} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2 \\ &\leq 3(1 - 2\alpha) \frac{m^{\frac{3}{2}}}{L}. \end{aligned} \quad (5.115)$$

Από την (5.114), λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}) &\leq f(\mathbf{x}) - \lambda^2(\mathbf{x}) \left(\frac{1}{2} - \frac{L\lambda(\mathbf{x})}{6m^{\frac{3}{2}}} \right) \\ &\stackrel{(5.115)}{\leq} f(\mathbf{x}) - \alpha\lambda^2(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \alpha \nabla f(\mathbf{x})^T \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}. \end{aligned} \quad (5.116)$$

Η ανισότητα (5.116) δηλώνει ότι η τιμή $t = 1$ είναι αποδεκτή από την αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση.

Στη συνέχεια, εξετάζουμε το ρυθμό σύγκλισης κατά τη διάρκεια της Φάσης II. Αρχικά, θα αποδείξουμε την (5.87). Υπενθυμίζουμε ότι $\mathbf{x}_+ = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}}$ και $\Delta\mathbf{x}_{\text{Nt}} =$

$-(\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x})$. Συνεπώς,

$$\begin{aligned}
 \|\nabla f(\mathbf{x}_+)\|_2 &= \|\nabla f(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2 \\
 &\stackrel{!!}{=} \left\| \int_0^1 (\nabla^2 f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}} dt \right\|_2 \\
 &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})\|_2 \|\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2 dt \\
 &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})\|_2 \|\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2 dt \\
 &\leq \frac{L}{2} \|\Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}\|_2^2 \\
 &= \frac{L}{2} \left\| (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \nabla f(\mathbf{x}) \right\|_2^2 \\
 &\leq \frac{L}{2} \left\| (\nabla^2 f(\mathbf{x}))^{-1} \right\|_2^2 \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2 \\
 &\leq \frac{L}{2m^2} \|\nabla f(\mathbf{x})\|_2^2.
 \end{aligned} \tag{5.117}$$

Η απόδειξη της σχέσης της δεύτερης γραμμής δίνεται στο Παράρτημα, στο τέλος του Κεφαλαίου. Παρατηρούμε ότι η τελευταία ανισότητα είναι ισοδύναμη με την (5.87).

Ανακεφαλαιώνοντας, αν $\|\nabla f(\mathbf{x}_k)\|_2 < \eta$, με $\eta = \min\{1, 3(1 - 2\alpha)\} \frac{m^2}{L}$, τότε η αναζήτηση γραμμής με οπισθοχώρηση επιστρέφει $t = 1$ και η σχέση (5.87) ισχύει.

Αντικαθιστώντας στην (5.97), λαμβάνουμε ότι ο αριθμός επαναλήψεων του αλγορίθμου Newton ο οποίος απαιτείται για να επιτύχουμε $f(\mathbf{x}_k) - p_* < \epsilon$ φράσσεται από πάνω από την ποσότητα

$$n_{\text{Newton}} := 6 + \frac{M^2 L^2}{m^5 \alpha \beta \min\{1, 9(1 - 2\alpha)^2\}} (f(\mathbf{x}_0) - p_*). \tag{5.118}$$

5.16 Υλοποίηση αλγορίθμου Newton

Δείτε το αντίστοιχο εδάφιο στο βιβλίο των Boyd, Vandenberghe.

Παράρτημα II

Ορίζουμε $\mathbf{g}(t) := \nabla f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}})$. Από τον κανόνα αλυσίδας, λαμβάνουμε ότι

$$D\mathbf{g}(t) = \nabla^2 f(\mathbf{x} + t \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}) \Delta \mathbf{x}_{\text{Nt}}. \tag{5.119}$$

Επιπλέον,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{g}(1) - \mathbf{g}(0) &= \int_0^1 D\mathbf{g}(t)dt \\
 \Longleftrightarrow \quad \nabla f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_{Nt}) - \nabla f(\mathbf{x}) &= \int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{Nt}) \Delta\mathbf{x}_{Nt} dt \\
 \Longleftrightarrow \quad \nabla f(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_{Nt}) - \nabla f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})\Delta\mathbf{x}_{Nt} & \quad (5.120) \\
 &= \int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{Nt}) \Delta\mathbf{x}_{Nt} dt - \int_0^1 \nabla^2 f(\mathbf{x})\Delta\mathbf{x}_{Nt} dt \\
 &= \int_0^1 (\nabla^2 f(\mathbf{x} + t\Delta\mathbf{x}_{Nt}) - \nabla^2 f(\mathbf{x})) \Delta\mathbf{x}_{Nt} dt.
 \end{aligned}$$