Metodi di Ottimizzazione per Big Data

LM Ingegneria Informatica – a.a. 2022/2023

Algoritmi di ottimizzazione non vincolata

Andrea Cristofari

Dipartimento di Ingegneria Civile e Ingegneria Informatica
Università di Roma "Tor Vergata"
Email: andrea.cristofari@uniroma2.it

Condizioni di ottimalità per problemi non vincolati

Consideriamo il seguente problema di ottimizzazione non vincolata

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{1}$$

con $f \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ (dove necessario assumeremo $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$)

Teorema 1 (Condizione necessaria del primo ordine)

Se $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ ed $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo locale del problema (1), allora $\nabla f(x^*) = 0$.

Dimostrazione alla lavagna.

Un punto x^* tale che $\nabla f(x^*) = 0$ viene detto punto stazionario

$\boxed{\nabla f(x^*) = 0 \text{ è una condizione necessaria, ma \underline{non sufficiente}, di ottimalità}}$

In altri termini, un punto stazionario potrebbe non essere né un punto di minimo locale, né un punto di minimo globale (ad esempio, $f(x) = x^3$)

Teorema 2 (Condizione necessaria del secondo ordine)

Se $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ ed $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo locale del problema (1), *allora $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$.*

Dimostrazione alla lavagna.

Teorema 3 (Condizione sufficiente del secondo ordine)

Se $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ ed esiste $x^* \in \mathbb{R}^n$ tale che $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x) \succeq 0$ in un intorno di x^*, allora x^* è un punto di minimo locale del problema (1).

Dimostrazione alla lavagna.

In particolare, la condizione sufficiente del secondo ordine è soddisfatta se $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$. In tal caso, si può mostrare che x^* è un punto di minimo locale stretto per il problema (1)

Teorema 4 (Minimi globali di una funzione convessa)

Se f è convessa, allora i punti di minimo locale e di minimo globale del problema (1) *coincidono. Inoltre, l'insieme dei punti di minimo globale del problema* (1) *è un insieme convesso.*

Dimostrazione alla lavagna.

Teorema 5 (Condizione necessaria e sufficiente per f convessa)

Se $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ ed è convessa, allora $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo globale del problema (1) *se e solo se $\nabla f(x^*) = 0$. In particolare, se f è strettamente convessa può esistere al più un unico punto di minimo globale.*

Dimostrazione alla lavagna.

Quindi, se la funzione obiettivo è convessa,

- punto stazionario $\Leftrightarrow$ punto di minimo locale $\Leftrightarrow$ punto di minimo globale
- condizioni di ottimalità necessarie e sufficienti

Teorema 6 (Condizioni per funzioni quadratiche)

Si consideri il problema (1) *con* $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$, *dove* $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simmetrica e* $c \in \mathbb{R}^n$. *Allora,*

- *se* $Q \not\succeq 0$, *allora non esistono punti di minimo locale di f*
- *esiste un punto di minimo globale se e solo se* $Q \succeq 0$ *ed esiste* $x^* \in \mathbb{R}^n$ *tale che* $\nabla f(x^*) = 0$, *in tal caso* x^* *è un punto di minimo globale;*
- *esiste un unico punto di minimo globale se e solo se* $Q \succ 0$.

Dimostrazione alla lavagna.

Schema generale

Possiamo dividere i metodi di ottimizzazione in

- metodi di ottimizzazione globale: cercano di individuare punti di minimo globale, devono tener conto del comportamento globale di f
- metodi di ottimizzazione locale: cercano di individuare punti stazionari (o punti di minimo locale), sono adatti per problemi a grandi dimensioni

Nel seguito analizzeremo alcuni metodi di ottimizzazione locale

Generico algoritmo iterativo

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
    Calcola $s_k \in \mathbb{R}^n$
    Poni $x_{k+1} = x_k + s_k$
End for

Un algoritmo genera una successione di punti $\{x_k\}$ che deve soddisfare delle proprietà di convergenza (asintotiche)

Diversi tipi di convergenza:

(i) Esiste un indice ν tale che x_ν è stazionario (convergenza finita)

(ii) Tutta la successione $\{x_k\}$ converge a un punto stazionario

(iii) Ogni punto di accumulazione di $\{x_k\}$ è stazionario

(iv) Esiste almeno un punto di accumulazione stazionario

Nel seguito, assumeremo che l'insieme di livello $\mathcal{L}^0 = \mathcal{L}(f(x^0))$ sia compatto per garantire l'esistenza di punti di accumulazione

Distinguiamo inoltre tra

- proprietà globali di convergenza dell'algoritmo: indipendenti dal punto di partenza x_0
- proprietà locali di convergenza dell'algoritmo: valgono solo in un intorno di un punto stazionario

Algoritmo globalmente convergente: comunque scelto un punto di partenza x_0, l'algoritmo converge converge in una delle modalità viste precedentemente

(usando punti di partenza diversi, potremmo ottenere soluzioni diverse)

Per determinare l'efficienza di un algoritmo, si studia la rapidità di convergenza (o velocità di convergenza)

Supponendo che $\{x_k\}$ converga a un punto x^*, si cerca di analizzare la velocità con cui l'errore $\|x_k - x^*\|$ tende a 0:

- Rapidità di convergenza lineare se $\|x_{k+1} - x^*\| \leq C\|x_k - x^*\|$ (per k sufficientemente grande), dove $C \in [0, 1)$ è una costante
- Rapidità di convergenza superlineare se $\displaystyle \lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$
- Rapidità di convergenza quadratica se $\|x_{k+1} - x^*\| \leq C\|x_k - x^*\|^2$ (per k sufficientemente grande), dove $C > 0$ è una costante

$$\boxed{\text{quadratica} \Rightarrow \text{superlineare} \Rightarrow \text{lineare}}$$

La rapidità di convergenza può far riferimento anche ai valori di funzione. Ad esempio, lineare se $f(x_{k+1}) - f(x^*) \leq C[f(x_k) - f(x^*)]$

Generica iterazione: $x_{k+1} = x_k + s_k$

Due principali classi di metodi:

- Metodi di line search, in cui $s_k = \alpha_k d_k$, dove
  - $d_k \in \mathbb{R}^n$ è una *direzione di ricerca*
  - $\alpha_k \in \mathbb{R}$, $\alpha_k \geq 0$, è un *passo* (stepsize)
- Metodi di trust region, in cui s_k è si ottiene minimizzando un modello (quadratico) della funzione obiettivo nell'intorno di x_k

Nel seguito analizzeremo alcuni metodi di line search

Metodi di line search

Dato un punto $x \in \mathbb{R}^n$, diciamo che $d \in \mathbb{R}^n$ è una direzione di discesa per f in x se esiste $\bar{\alpha} > 0$ tale che $f(x + \alpha d) < f(x)$ per ogni $\alpha \in (0, \bar{\alpha}]$

Quindi, lungo una direzione di discesa è possibile ottenere un decremento della funzione obiettivo facendo passi “sufficientemente piccoli”

Idea alla base dei metodi di line search:

(i) Individuare una direzione di discesa d_k

(ii) Muoversi lungo d_k con un passo α_k che assicuri un decremento della funzione obiettivo

Come scegliere d_k? Come scegliere α_k? Come dimostrare la convergenza?

Teorema 7 (Condizione sufficiente di discesa)

Se $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ e $\nabla f(x)^T d < 0$, allora d è una direzione di discesa per f in x.

Dimostrazione alla lavagna.

Quindi, $d = -\nabla f(x)$ è una direzione di discesa in ogni punto x non stazionario, in quanto $\nabla f(x)^T d = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0 \Leftrightarrow \nabla f(x) \neq 0$

La direzione $d = -\nabla f(x)$ è anche le direzione di discesa più ripida, in quanto è soluzione di $\min\limits_{\|d\| \leq 1} \nabla f(x)^T d$

E' immediato verificare che ogni direzione del tipo $d = -Q\nabla f(x)$ è di discesa se Q è simmetrica e definita positiva

All'iterazione k, supponiamo di avere una direzione di discesa d_k (ad esempio, $d_k = -\nabla f(x_k)$). Vogliamo scegliere il passo $\alpha_k > 0$ con cui muoverci lungo d_k

Abbiamo (almeno) due possibilità:

(i) Line search esatta: α_k è scelto minimizzando f lungo d_k, cioè

$$\alpha_k \in \operatorname*{Argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$$

In generale, il calcolo di un passo esatto

- può essere infattibile in pratica (richiede a sua volta un metodo di ottimizzazione globale), a meno che f non abbia una struttura particolare (ad esempio, se è quadratica strettamente convessa)
- non presenta particolari vantaggi da un punto di vista pratico

Per una funzione $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$, con $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simmetrica definita positiva e $c \in \mathbb{R}^n$, il passo esatto α_k è facilmente calcolabile:

$$\alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{d_k^T Q d_k} = -\frac{(Qx_k - c)^T d_k}{d_k^T Q d_k}$$

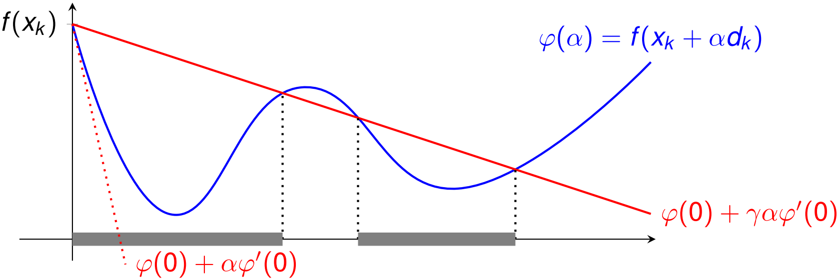
(ii) Line search inesatta: α_k è scelto in modo da ottenere un <u>sufficiente decremento</u> di f

Un passo inesatto può essere facilmente calcolato con procedure iterative

Metodo di Armijo

Dati $x_k \in \mathbb{R}^n$, $d_k \in \mathbb{R}^n$, $\Delta > 0$ e $\gamma, \delta \in (0, 1)$
Poni $\alpha = \Delta$
While $f(x_k + \alpha d_k) > f(x_k) + \gamma\alpha\nabla f(x_k)^T d_k$
    Poni $\alpha = \delta\alpha$
End while
Poni $\alpha_k = \alpha$

Quindi α_k è tale che $\underbrace{f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma\alpha_k\nabla f(x_k)^T d_k}_{\text{condizione di Armijo}}$



Teorema 8 (Terminazione finita del metodo di Armijo)

Se $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$, allora in un numero finito di iterazioni il metodo di Armijo determina un passo $\alpha_k > 0$ tale che $f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma\alpha\nabla f(x_k)^T d_k$.

Dimostrazione alla lavagna.

Se $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ per ogni $k \geq 0$, abbiamo

$$f(x_{k+1}) = f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \gamma\alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k < f(x_k)$$
$$\Downarrow$$
$$\text{la successione } \{f(x_k)\} \text{ è monotona decrescente}$$

Metodo del gradiente

Metodo del gradiente con line search di Armijo

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
    Poni $d_k = -\nabla f(x_k)$
    Calcola α_k con il metodo di Armijo
    Poni $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
End for

Teorema 9 (Convergenza metodo del gradiente con line search)

Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo del gradiente con line search di Armijo. Se $\mathcal{L}^0$ è compatto, allora $\{x_k\}$ ammette punti di accumulazione in $\mathcal{L}^0$ e ogni punto di accumulazione è un punto stazionario.

Dimostrazione alla lavagna.

Se ∇f è Lipschitz continuo con costante L,

$$\underbrace{f(x_k + \alpha d_k) \leq f(x_k) + \alpha \nabla f(x_k)^T d_k + \frac{L}{2}\alpha^2 \|d_k\|^2}_{\text{descent lemma}} \qquad \forall \alpha \in \mathbb{R}$$

Quindi la condizione di Armijo è soddisfatta con

$$\alpha \in \left(0, \frac{2(\gamma - 1)\nabla f(x_k)^T d_k}{L\|d_k\|^2}\right]$$

Con $d_k = -\nabla f(x_k)$, la condizione di Armijo è quindi soddisfatta con

$$\alpha \in \left(0, \frac{2(1-\gamma)}{L}\right]$$

Ad esempio, ponendo $\gamma = 1/2$ possiamo usare un passo costante $\alpha_k = \dfrac{1}{L}$ a ogni iterazione del metodo del gradiente (in genere L non è nota, a volte si riesce a calcolarne una sovrastima)

Sempre sotto l'ipotesi di Lipschitz continuità di ∇f, è possibile anche dimostrare la convergenza del metodo del gradiente con diminishing stepsize. In particolare, il passo $\alpha_k > 0$ deve essere tale che

$$\lim_{k \to \infty} \alpha_k = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = \infty$$

Ad esempio, possiamo usare $\alpha_k = \dfrac{1}{k+1}$ per ogni $k \geq 0$

- Pro: non è mai necessario calcolare f (può essere un'operazione computazionalmente onerosa)
- Contro: la convergenza è solitamente lenta in pratica

Teorema 10 (Convergenza lineare metodo del gradiente)

Si assuma che f sia fortemente convessa con costante μ e ∇f sia Lipschitz continuo con costante L. Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo del gradiente con passo costante $\alpha_k = 1/L$ e sia f^* il valore ottimo di f. Allora,

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{L}\right)(f(x_k) - f^*) \quad \forall k \geq 0.$$

Dimostrazione alla lavagna.

Usando $(1 - c)^k \leq e^{-kc}$ per ogni $c \in (0, 1)$ e per ogni $k \geq 0$, sotto le ipotesi del Teorema 10 sono necessarie al più $\mathcal{O}\big(\log(\varepsilon^{-1})\big)$ iterazioni per avere $f(x_k) - f^* \leq \varepsilon$, con $\varepsilon \in (0, 1)$

Variazioni del metodo del gradiente:

- Metodo del gradiente spettrale (o metodo di Barzilai-Borwein): $d_k = -c_k \nabla f(x_k)$, dove

$$c_k = \frac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}} \quad \text{oppure} \quad c_k = \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|y_{k-1}\|^2}$$

  con $s_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ e $y_{k-1} = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$
  E' necessario assicurare che $0 < c_{\min} \leq c_k \leq c_{\max} < \infty$

- Metodo heavy-ball (o metodo del gradiente con momentum): iterazione definita da

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k) + \beta (x_k - x_{k-1}),$$

  con $\alpha, \beta \geq 0$

Estensioni

Vediamo ora come estendere i risultati procedenti a un'ampia classe di metodi

Definiamo innanzitutto una funzione $\sigma \colon [0, \infty) \to [0, \infty)$ come funzione di forzamento se per ogni successione $\{t_k\} \subseteq [0, \infty)$ tale che $\lim_{k\to\infty} \sigma(t_k) = 0$ abbiamo $\lim_{k\to\infty} t_k = 0$

Ad esempio, $\sigma(t) = t^q$, con $q \geq 0$, è una funzione di forzamento, così come la funzione costante

Proposizione 1

Si consideri una successione $\{x_k\}$ *tale che* $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, *con* $\alpha_k \in \mathbb{R}$ *e* $d_k \in \mathbb{R}^n$. *Assumiamo che:*

(i) $\displaystyle\lim_{k\to\infty} \frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{\|d_k\|} = 0,$

(ii) *esiste una funzione di forzamento* $\sigma : [0,\infty) \to [0,\infty)$ *tale che* $\displaystyle\frac{|\nabla f(x_k)^T d_k|}{\|d_k\|} \geq \sigma(\|\nabla f(x_k)\|)$ *per ogni* $d_k \neq 0$.

Allora, ogni punto di accumulazione di $\{x_k\}$ *è un punto stazionario.*

Dimostrazione alla lavagna.

(Imponendo l'ulteriore condizione $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$ per ogni $k \geq 0$, ogni punto di accumulazione $x^* \in \mathcal{L}^0$)

Il punto (i) della Proposizione 1 può essere soddisfatto usando, con una direzione di discesa, una line search di Armijo con una condizione di sufficiente spostamento: invece di un passo costante Δ, si usa un passo iniziale Δ_k tale che

$$\Delta_k \geq \frac{1}{\|d_k\|} \sigma\left(\frac{|\nabla f(x_k)^T d_k|}{\|d_k\|} \right) \tag{2}$$

per una qualche funzione di forzamento $\sigma(t)$

Scelta semplice (in generale non la più conveniente): $\Delta_k = \dfrac{c}{\|d_k\|}$, con $c > 0$

Altra possibile scelta: $\Delta_k = \Delta$ se $\nabla f(x_k)^T d_k \leq -c\|\nabla f(x_k)\|^2$, con $c > 0$

Si noti che, nel caso in cui ∇f è Lipschitz continuo con costante L, possiamo usare $\alpha_k = \dfrac{2(\gamma - 1)\nabla f(x_k)^T d_k}{L\|d_k\|^2}$, in quanto

- sufficiente decremento dal descent lemma
- sufficiente spostamento usando $\sigma(t) = 2(1 - \gamma)t/L$

Teorema 11

Sia $\{x_k\}$ una successione definita dall'iterazione

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

dove $d_k \in \mathbb{R}^n$ è tale che $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$ ed α_k è scelto con una line search di Armijo usando un passo iniziale Δ_k che soddisfa la (2). Se $\mathcal{L}^0$ è compatto, allora

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{\|d_k\|} = 0.$$

Dimostrazione alla lavagna.

Con gli stessi ragionamenti, si ottiene lo stesso risultato se si usa un qualsiasi passo $\alpha_k > 0$ tale che $f(x_{k+1}) \leq f(x_k + \alpha_k^A d_k)$, dove α_k^A è il passo di Armijo. In particolare anche per la line search esatta $\alpha_k \in \mathrm{Argmin}_{\alpha\geq 0} f(x_k + \alpha d_k)$

Il punto (ii) della Proposizione 1 può essere soddisfatto utilizzando d_k tale da soddisfare una condizione d'angolo del tipo

$$\nabla f(x_k)^T d_k \leq -c\|d_k\|\|\nabla f(x_k)\|, \quad c > 0,$$

oppure condizioni del tipo

$$\nabla f(x_k)^T d_k \leq -c_1\|\nabla f(x_k)\|^2 \quad \text{e} \quad \|d_k\| \leq c_2\|\nabla f(x_k)\|, \quad c_1, c_2 > 0,$$

oppure scegliendo

$$d_k = -Q_k \nabla f(x_k)$$

con $Q_k \succ 0$ simmetrica tale che $0 < m < \lambda_{\min}(Q_k) \leq \lambda_{\max}(Q_k) \leq M < \infty$

Metodo del gradiente coniugato

Data una matrice simmetrica $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, due vettori non nulli $d_i, d_j \in \mathbb{R}^n$ si dicono *coniugati* rispetto a Q se $d_i^T Q d_j = 0$

Proposizione 2 (Indipendenza lineare direzioni coniugate)

Sia $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matrice simmetrica e sia $\{d_0, \ldots, d_m\}$ un insieme di vettori mutuamente coniugati rispetto a Q tali che $d_i^T Q d_i \neq 0$ per ogni $i = 0, 1, \ldots, m$. Allora $d_0, \ldots, d_m$ sono linearmente indipendenti.

Dimostrazione alla lavagna.

Se $d_0, \ldots, d_m$ mutuamente coniugati rispetto a una matrice simmetrica $Q \succ 0$:

- $m \leq n - 1$
- $d_0, \ldots, d_{n-1}$ formano una base di $\mathbb{R}^n$

Consideriamo una funzione quadratica $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$ con $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simmetrica definita positiva e $c \in \mathbb{R}^n$

Siano $d_0, \dots, d_{n-1}$ mutuamente coniugati rispetto a Q e sia x^* punto di minimo di f. Allora

$$x^* = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j d_j$$

$$\Downarrow$$

$$d_i^T Qx^* = \alpha_i d_i^T Qd_i, \quad i = 0, \dots, n-1$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_i = \frac{d_i^T Qx^*}{d_i^T Qd_i} = \frac{d_i^T c}{d_i^T Qd_i}, \quad i = 0, \dots, n-1$$

$$\Downarrow$$

$$x^* = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i^T c}{d_i^T Qd_i} d_i$$

Possiamo definire una procedura iterativa partendo da $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e spostandoci lungo direzioni coniugate $d_0, \dots, d_{n-1}$ con un passo $\alpha_0, \dots, \alpha_{n-1}$

$$x^* = x_0 + \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k d_k$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha_k = \frac{d_k^T Q(x^* - x_0)}{d_k^T Q d_k}, \quad k = 0, \dots, n-1$$

A ogni iterazione k abbiamo $x_k - x_0 = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i d_i$ e dalla coniugatezza delle direzioni segue che $d_k^T Q(x_k - x_0) = 0$

Quindi $\alpha_k = \frac{d_k^T Q(x^* - x_0)}{d_k^T Q d_k} = \frac{d_k^T Q(x^* - x_k + x_k - x_0)}{d_k^T Q d_k} = \frac{d_k^T Q(x^* - x_k)}{d_k^T Q d_k}$

Dato che $Q(x^* - x_k) = c - Qx_k = -\nabla f(x_k)$, otteniamo $\underbrace{\alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{d_k^T Q d_k}}_{\text{passo esatto}}$

Teorema 12 (Convergenza direzioni coniugate per f quadratica)

Sia $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$ *con* $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simmetrica definita positiva e* $c \in \mathbb{R}^n$*. Assumiamo che* $\{d_0, \dots, d_{n-1}\}$ *siano vettori mutuamente coniugati rispetto a* Q *e consideriamo il metodo delle direzioni coniugate definito dall'iterazione*

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad \textit{dove} \quad \alpha_k = -\frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{d_k^T Q d_k}.$$

Allora,

(i) *per ogni* $k = 1, \dots, n$*, si ha che* $\nabla f(x_k)^T d_i = 0$ *per ogni* $i = 0, \dots, k-1$*;*

(ii) *esiste* $m \le n-1$ *tale che* x_{m+1} *è il punto di minimo globale di* f*.*

Dimostrazione alla lavagna.

Consideriamo $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$ con $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simmetrica e $c \in \mathbb{R}^n$

Metodo del gradiente coniugato per funzioni quadratiche

Dato $x^0 \in \mathbb{R}^n$, poni $d_0 = -\nabla f(x^0)$

For $k = 0, 1, \ldots$

Poni

$$
\begin{aligned}
\alpha_k &= -\frac{\nabla f(x_k)^T d_k}{d_k^T Q d_k} \\
x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k \\
\beta_{k+1} &= \frac{\nabla f(x_{k+1})^T Q d_k}{d_k^T Q d_k} \\
d_{k+1} &= -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_{k+1} d_k
\end{aligned}
$$

End for

Lemma 1

Sia $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$ *con* $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simmetrica definita positiva e* $c \in \mathbb{R}^n$*.*
Allora, a ogni iterazione $k \geq 0$*,*

(i) $d_{k+1}^T Qd_k = 0$,

(ii) $\nabla f(x_{k+1})^T d_k = 0$,

(iii) $\nabla f(x_k)^T d_k = -\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k) = -\|\nabla f(x_k)\|^2$,

(iv) $\alpha_k = \dfrac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{d_k^T Qd_k}$,

(v) $d_k = 0 \Leftrightarrow \nabla f(x_k) = 0 \Leftrightarrow \alpha_k = 0$.

Dimostrazione alla lavagna.

Teorema 13 (Convergenza gradiente coniugato per f quadratica)

Sia $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx - c^T x$ *con* $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *simmetrica definita positiva e* $c \in \mathbb{R}^n$*.*
Allora, esiste $m \leq n-1$ *tale che* x_{m+1} *è il punto di minimo globale di* f*.*

Dimostrazione alla lavagna.

Si può mostrare che il massimo numero di iterazioni è limitato dal numero di autovalori distinti di Q

Se $Q \succeq 0$ ed f ammette punti di minimi globale, si può mostrare che il metodo

- è ancora ben definito perchè $d_k^T Qd_k = 0$ se e solo se $\nabla f(x_k) = 0$
- restituisce un punto di minimo globale di f in al più n iterazioni

Per funzioni non quadratiche (metodo del *gradiente coniugato non lineare*):

- opportuna scelta di β_{k+1}, tra le più note abbiamo
  - $\beta_{k+1} = \dfrac{\|\nabla f(x_{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x_k)\|^2}$ (Fletcher-Reeves)
  - $\beta_{k+1} = \dfrac{\nabla f(x_{k+1})^T(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k))}{\|\nabla f(x_k)\|^2}$ (Polyak-Polak-Ribiére)
- opportuna line search per scegliere α_k

Metodo di Newton

Se $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, usando lo sviluppo di Taylor del <u>secondo ordine</u> possiamo scrivere

$$f(x+s) = f(x) + \nabla f(x)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 f(x) s + o(\|s\|^2)$$

Quindi possiamo approssimare f nell'intorno di x_k con un modello quadratico:

$$f(x_k+s) \approx q_k(s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 f(x_k) s$$

per poi calcolare $s_k \in \operatorname{Argmin} q_k(s)$ e porre $x_{k+1} = x_k + s_k$

Per minimizzare $q_k(s)$, osserviamo che $\nabla q_k(s) = \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)s$

Quindi, se $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$, otteniamo

$$s_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$$

(Invertire una matrice è un'operazione computazionalmente onerosa, nella pratica è preferibile risolvere il sistema lineare $\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)s = 0$)

Metodo di Newton

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
    Poni $x_{k+1} = x_k - \nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$
End for

Teorema 14 (Convergenza metodo di Newton)

Sia $\{x_k\}$ *la successione generata dal metodo di Newton. Se esiste* $x^* \in \mathbb{R}^n$ *tale che* $\nabla f(x^*) = 0$ *e* $\nabla^2 f(x^*)$ *è non singolare, allora esiste un intorno* $\mathcal{B}(x^*;\rho)$ *di* x^* *tale che, se* $x_0 \in \mathcal{B}(x^*;\rho)$*, allora* $\{x_k\}$ *converge a* x^* *con rapidità superlineare, cioè*

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0.$$

Inoltre, se $\nabla^2 f$ *è Lipschitz continua, la rapidità di convergenza è quadratica, cioè esiste una costante* $C > 0$ *tale che*

$$\|x_{k+1} - x^*\| \le C\|x_k - x^*\|^2 \quad \forall k \ge 0.$$

Dimostrazione alla lavagna.

- Pro: rapidità di convergenza superlineare
- Contro: s_k potrebbe non essere definita in x_k, la convergenza è solo locale e x^* potrebbe essere un punto di massimo

Inoltre, le operazioni con la matrice Hessiana possono essere computazionalmente onerose, quindi il metodo non è adatto a problemi a grandi dimensioni

Estensioni del metodo di Newton

Esistono diverse estensioni del metodo di Newton che assicurano convergenza globale mantenendo una rapidità di convergenza superlineare

Principalmente, modifiche globalmente convergenti del metodo di Newton sono ottenute usando

- tecniche di line search applicate a un direzione di discesa costruita a partire dalla direzione di Newton (anche combinandola con una direzione di un metodo convergente, come l'antigradiente) o modificando $\nabla^2 f(x_k)$
- metodi di trust region, in cui $s_k \in \operatorname{Argmin}_{\|s\| \leq \Delta_k} q_k(s)$, aggiornando opportunamente Δ_k nel corso delle iterazioni (si possono usare approssimazioni di $\nabla^2 f(x_k)$)
- metodi di regolarizzazione, in cui viene $s_k \in \operatorname{Argmin}_{s \in \mathbb{R}^n} q_k(s) + \sigma_k \|s\|^3$, aggiornando opportunamente σ_k nel corso delle iterazioni (si possono usare approssimazioni di $\nabla^2 f(x_k)$)

Varianti che non richiedono la memorizzazione di $\nabla^2 f(x_k)$:

- metodi di Quasi-Newton (a memoria limitata): in cui $\nabla^2 f(x_k)$ è approssimata con un'opportuna matrice (ottenuta mediante memorizzazione di pochi vettori)
- metodi di Newton troncato: in cui il sistema di Newton $\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k) s = 0$ è risolto in maniera approssimata con una precisione crescente

Se si usa la line search, per avere rapidità di convergenza superlineare (o quadratica), è necessario assicurare che $\alpha_k = 1$ venga accettato in un intorno della soluzione ottima

Nei metodi di Quasi-Newton, si cerca di approssimare opportunamente $\nabla^2 f(x_k)$ (formule dirette) oppure $\nabla^2 f(x_k)^{-1}$ (formule inverse)

Per una funzione quadratica $q(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$ con Q simmetrica, abbiamo che

$$\nabla q(x) - \nabla q(y) = Q(x - y) \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

Se Q è non singolare, possiamo anche scrivere

$$Q^{-1}(\nabla q(x) - \nabla q(y)) = x - y \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

Per iterazione $k \geq 0$, definiamo $s_k = x_{k+1} - x_k$ e $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$

- Formule dirette: cerchiamo una matrice B_{k+1} tale che

$$y_k = B_{k+1} s_k$$
$$B_{k+1} = B_k + \Delta B_k$$

  e calcoliamo una direzione d_k tale che $B_k d_k + \nabla f(x_k) = 0$

- Formule inverse: cerchiamo una matrice H_{k+1} tale che

$$H_{k+1} y_k = s_k$$
$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k$$

  e calcoliamo una direzione $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$

- Formule di rango 1 (generalmente usate per sistemi di equazioni):

$$\begin{cases} \Delta B_k &= \dfrac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \\ \Delta H_k &= \dfrac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k} \end{cases}$$

- Formule di rango 2 (generalmente usate per problemi di ottimizzazione):

$$\text{BFGS} \begin{cases} \Delta B_k &= \dfrac{y_k y_k^T}{s_k^T y_k} - \dfrac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} \\ \Delta H_k &= \left(1 + \dfrac{y_k^T H_k y_k}{s_k^T y_k}\right) \dfrac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \dfrac{s_k y_k^T H_k + H_k y_k s_k^T}{s_k^T y_k} \end{cases}$$

Nei metodi a memoria limitata (L-BFGS), le matrice H_k è ottenuta implicitamente nel calcolo di $H_k \nabla f(x_k)$ memorizzando i vettori s_{k-i} e y_{k-i}, $i = 0, \ldots, m-1$

A partire dall'equazione di Quasi-Newton diretta, se vogliamo approssimare B_k con $\mu_k I$, possiamo scegliere

$$\mu_k \in \operatorname*{Argmin}_{\mu \in \mathbb{R}} \|\mu s_{k-1} - y_{k-1}\|^2 \quad \Rightarrow \quad \mu_k = \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|s_{k-1}\|^2}$$

Quindi poniamo $d_k = -\dfrac{1}{\mu_k}\nabla f(x_k) = \underbrace{-\dfrac{\|s_{k-1}\|^2}{s_{k-1}^T y_{k-1}}\nabla f(x_k)}_{\text{gradiente spettrale}}$

A partire dall'equazione di Quasi-Newton inversa, se vogliamo approssimare H_k con $\mu_k I$, possiamo scegliere

$$\mu_k \in \operatorname*{Argmin}_{\mu \in \mathbb{R}} \|\mu y_{k-1} - s_{k-1}\|^2 \quad \Rightarrow \quad \mu_k = \frac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|y_{k-1}\|^2}$$

Quindi poniamo $d_k = -\mu_k \nabla f(x_k) = \underbrace{-\dfrac{s_{k-1}^T y_{k-1}}{\|y_{k-1}\|^2}\nabla f(x_k)}_{\text{gradiente spettrale}}$

Nei metodi di Newton troncato con line search, a ogni iterazione k:

- La direzione d_k è ottenuta applicando il metodo del gradiente coniugato alla funzione quadratica $q_k(d)$, generando i punti $d_{(i+1)} = d_{(i)} + \alpha_{(i)} p_{(i)}$, con $p_{(i)}$ direzioni del metodo del gradiente coniugato e $\alpha_{(i)}$ corrispondenti passi, partendo da $d_{(i)} = 0$

  Si arresta il metodo del gradiente coniugato quando si genera un punto $d_{(i)}$ tale che $\|\nabla q_k(d_{(i)})\|$ è "sufficientemente piccolo", oppure se si trova una direzione a curvatura "non sufficientemente positiva"

  In particolare, a ogni iterazione i del metodo del gradiente coniugato:

  - se $p_{(i)}$ tale che $p_{(i)}^T \nabla^2 f(x_k) p_{(i)} \leq \varepsilon \|p_{(i)}\|^2$ per un certo $\varepsilon > 0$, si pone
  $$d_k = \begin{cases} -\nabla f(x_k) & \text{se } i = 0 \\ d_{(i)} & \text{se } i \geq 1 \end{cases}$$
  - se $\|\nabla q_k(d_{(i+1)})\| \leq \eta \|\nabla f(x_k)\| \min\{\frac{1}{k+1}, \|\nabla f(x_k)\|\}$ per un certo $\eta \geq 0$, si pone $d_k = d_{(i+1)}$ (troncamento)

- Si calcola un passo α_k lungo d_k usando una line search e si pone $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

Teorema 15 (Convergenza metodo Newton troncato)

Sia $\{x_k\}$ *la successione generata dal metodo di Newton troncato con line search di Armijo usando un passo iniziale* $\Delta = 1$*. Se* $\mathcal{L}^0$ *è compatto, allora esistono due costanti* $c_1, c_2 > 0$ *tali che* $\nabla f(x_k)^T d_k \leq -c_1 \|\nabla f(x_k)\|^2$ *e* $\|d_k\| \leq c_2 \|\nabla f(x_k)\|$ *per ogni iterazione* $k \geq 0$*.*
Quindi $\{x_k\}$ *ammette punti di accumulazione in* $\mathcal{L}^0$ *e, dalla Proposizione 1 e dal Teorema 11, ogni punto di accumulazione è un punto stazionario.*

Inoltre, se sono soddisfatte le ipotesi del Teorema di Newton, abbiamo la stessa rapidità di convergenza del metodo di Newton ($\alpha_k = 1$ viene sempre accettato in un intorno della soluzione ottima)

Nell'algoritmo, $\nabla^2 f(x_k)$ premoltiplica sempre $p_{(i)}$ $\Rightarrow$ non è mai necessario calcolare esplicitamente $\nabla^2 f(x_k)$, ma è sufficiente definire l'operazione di prodotto tra matrice Hessiana e vettore

Esistono anche altre variazioni del metodo, con

- diversi criteri di troncamento
- utilizzo di direzioni a curvatura negativa (cioè tali che $p_{(i)}^T \nabla^2 f(x_k) p_{(i)} < 0$)

In molti metodi (tra cui quelli di tipo Newton) una maggiore efficienza pratica si può ottenere usando una line search non monotona:

$$f(x_{k+1}) \leq W_k + \gamma \alpha_k \nabla f(x_k)^T d_k \quad \text{con } W_k \geq f(x_k)$$

Ad esempio $W_k = \max\limits_{0 \leq j \leq \min\{k,M\}} f(x_{k-j})$ con $M \geq 0$

Metodo di Armijo non monotono

Dati $x_k \in \mathbb{R}^n$, $d_k \in \mathbb{R}^n$, $\Delta > 0$, $\gamma, \delta \in (0,1)$ e $M \geq 0$
Poni $\alpha = \Delta$ e $W_k = \max\limits_{0 \leq j \leq \min\{k,M\}} f(x_{k-j})$
While $f(x_k + \alpha d_k) > W_k + \gamma \alpha \nabla f(x_k)^T d_k$
    Poni $\alpha = \delta \alpha$
End while
Poni $\alpha_k = \alpha$

Ragionando come nella dimostrazione del Teorema 8, segue che il metodo di Armijo non monotono termina in un numero finito di iterazioni

Se la direzione d_k è tale che $\nabla f(x_k)^T d_k \leq -c_1 \|\nabla f(x_k)\|^2$ e $\|d_k\| \leq c_2 \|\nabla f(x_k)\|$ per ogni iterazione $k \geq 0$, con $c_1, c_2 > 0$, allora si può dimostrare che ogni punto di accumulazione di $\{x_k\}$ è un punto stazionario

Metodi a blocchi

Per problemi a grandi dimensioni, l'utilizzo di metodi "classici" può essere proibitivo per motivi computazionali

Nei metodi a blocchi (o metodi di decomposizione), a ogni iterazione viene aggiornato solamente un blocco di variabili, chiamato *working set*

Tali metodi sono particolarmente adatti per problemi a grandi dimensioni con strutture vantaggiose, dove si possono implementare in maniera efficiente le operazioni di

- aggiornamento di un blocco di variabili
- aggiornamento di f
- aggiornamento di ∇f

Schema generale di un metodo a blocchi

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \dots$
    Scegli un working set $W_k \subseteq \{1, \dots, n\}$
    Calcola $s_k \in \mathbb{R}^n$ tale che $(s_k)_i = 0$ per ogni $i \notin W_k$
    Poni $x_{k+1} = x_k + s_k$
End for

I vari metodi a blocchi differiscono per

- la regola di selezione del working set W_k
- la regola di aggiornamento delle variabili (cioè il calcolo di s_k)

Regole (deterministiche) di selezione del working set:

(i) Gauss-Southwell (greedy): viene scelto il blocco di variabili contenente la variabile (o le variabili) che maggiormente violano una condizione di ottimalità, ad esempio:
   - scegli $i_k \in \operatorname*{Argmax}_{i=1,\dots,n} |\nabla_i f(x_k)|$
   - scegli $W_k \subseteq \{1, \dots, n\}$ tale che $i_k \in W_k$ (una scelta possibile è $W_k = \{i_k\}$)

(ii) Gauss-Seidel (ciclico): i blocchi di variabili vengono scelti uno alla volta in maniera ciclica, ad esempio:
   - partiziona $\{1, \dots, n\}$ in $m \leq n$ blocchi (una scelta possibile è $\{1\}, \{2\}, \dots, \{n\}$)
   - scegli W_k come il blocco i_k-esimo, dove $i_k = \mathrm{mod}(k, m)$

Regole di aggiornamento delle variabili:

(i) Minimizzazione esatta:

- $s_k \in \{\mathrm{Argmin}\, f(x_k + s) \colon s_i = 0\, \forall i \notin W_k\}$
- $x_{k+1} = x_k + s_k$

(E' equivalente a scrivere $x_{k+1} \in \{\mathrm{Argmin}\, f(x) \colon x_i = (x_k)_i\, \forall i \notin W_k\}$)

(ii) Minimizzazione inesatta (line search):

- calcola una direzione d_k tale che $(d_k)_i = 0\, \forall i \notin W_k$
- scegli α_k con una line search
- poni $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$

Tutti questi metodi sono anche noti come metodi block coordinate descent, o semplicemente come metodi coordinate descent quando abbiamo blocchi di una sola variabile

I risultati di convergenza dipendono sia dalla regola di selezione del working set, sia dalla regola di aggiornamento delle variabili

Per semplicità, analizzeremo la convergenza solo dei metodi coordinate descent (quindi con blocchi costituiti da singole variabili)

Metodo coordinate descent Gauss-Southwell con line search di Armijo

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
    Scegli $i_k \in \mathrm{Argmax}_{i=1,\ldots,n} |\nabla_i f(x_k)|$
    Calcola $(d_k)_i = \begin{cases} -\nabla_i f(x_k) & \text{se } i = i_k \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$
    Calcola α_k con una line search di Armijo usando un passo iniziale Δ
    Poni $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
End for

Teorema 16 (Convergenza Gauss-Southwell con line search)

Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo coordinate descent Gauss-Southwell con line search di Armijo. Se $\mathcal{L}^0$ è compatto, allora $\{x_k\}$ ammette punti di accumulazione in $\mathcal{L}^0$ e ogni punto di accumulazione è un punto stazionario.

Dimostrazione alla lavagna.

Metodo coordinate descent Gauss-Southwell con minimizzazione esatta

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
    Scegli $i_k \in \text{Argmax}_{i=1,\ldots,n} |\nabla_i f(x_k)|$
    Calcola $s_k \in \{\text{Argmin}\, f(x_k + s) \colon s_i = 0 \, \forall i \neq i_k\}$
    Poni $x_{k+1} = x_k + s_k$
End for

Teorema 17 (Convergenza Gauss-Southwell)

Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo coordinate descent Gauss-Southwell con minimizzazione esatta. Se $\mathcal{L}^0$ è compatto, allora $\{x_k\}$ ammette punti di accumulazione in $\mathcal{L}^0$ e ogni punto di accumulazione è un punto stazionario.

Dimostrazione alla lavagna.

Teorema 18 (Convergenza lineare Gauss-Southwell)

Si assuma che f sia fortemente convessa con costante μ e ∇f sia Lipschitz continuo con costante L. Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo coordinate descent Gauss-Southwell con passo costante $\alpha_k = 1/L$ e sia f^* il valore ottimo di f. Allora,

$$f(x_{k+1}) - f^* \leq \left(1 - \frac{\mu}{nL}\right)(f(x_k) - f^*) \quad \forall k \geq 0.$$

Dimostrazione alla lavagna.

Metodo coordinate descent Gauss-Seidel con line search

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$
For $k = 0, 1, \ldots$
  Poni $i_k = \mathrm{mod(k+1,n)}$
  Calcola $(d_k)_i = \begin{cases} -\nabla_i f(x_k) & \text{se } i = i_k \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$
  Se $d_k \neq 0$, calcola α_k con line search di Armijo usando un passo iniziale Δ, altrimenti poni $\alpha_k = 0$
  Poni $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
End for

Teorema 19 (Convergenza Gauss-Seidel con line search)

Sia $\{x_k\}$ la successione generata dal metodo coordinate descent Gauss-Seidel con line search di Armijo. Se $\mathcal{L}^0$ è compatto, allora $\{x_k\}$ ammette punti di accumulazione in $\mathcal{L}^0$ e ogni punto di accumulazione è un punto stazionario.

Dimostrazione alla lavagna.

Si può anche mostrare che si ha rapidità di convergenza lineare se ∇f è Lipschitz continuo ed f è fortemente convessa

Metodo coordinate descent Gauss-Seidel con minimizzazione esatta

Dato $x_0 \in \mathbb{R}^n$

For $k = 0, 1, \ldots$

    Poni $i_k =$ mod(k+1,n)

    Calcola $s_k \in \{\text{Argmin}\, f(x_k + s)\colon\, s_i = 0\, \forall i \neq i_k\}$

    Poni $x_{k+1} = x_k + s_k$

End for

La convergenza del metodo richiede ulteriori ipotesi, in particolare si può dimostrare che il metodo converge se f è convessa

È anche possibile usare regole probabilistiche per scegliere il working set: nei metodi random coordinate descent il blocco di variabili è scelto casualmente secondo una certa distribuzione di probabilità (ad esempio, uniforme)

In questo caso, abbiamo risultati di convergenza in valore atteso