Capitolul 3

Metode de ordinul I

3.1 Preliminarii

În acest capitol abordăm probleme neliniare de optimizare neconstrânsă (*unconstrained nonlinear programming* - UNLP):

$$(UNLP): \qquad \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \tag{3.1}$$

unde funcţia obiectiv f este de două ori diferenţiabilă. Conform condiţiilor de optimalitate necesare pentru problema (3.1), orice punct de minim local pentru problema (UNLP), x^*, satisface următoarele relaţii:

$$\nabla f(x^*) = 0, \qquad \nabla^2 f(x^*) \succcurlyeq 0.$$

În plus, dacă pentru un punct $y^* \in \mathrm{dom} f$ avem $\nabla f(y^*) = 0$ şi $\nabla^2 f(y^*) \succ 0$, atunci y^* este punct de minim local strict pentru problema (UNLP) dată în (3.1).

Condiţiile de optimalitate joacă un rol fundamental în dezvoltarea algoritmilor eficienţi din domeniul optimizării (vezi $[1, 2]$). În particular, condiţiile de ordinul I stau la baza unei clase relativ largi de metode de ordin I (metode ce folosesc evaluarea funcţiei şi informaţie de gradient). În cazul convex, găsirea unui punct ce satisface condiţiile de optimalitate necesare este echivalentă cu rezolvarea problemei de optimizare originale (deoarece condiţiile de ordinul I sunt suficiente). Acest argument furnizează o imagine clară asupra facilităţilor *optimizării convexe* faţă de cazurile neconvexe, unde pentru găsirea unui punct minim/maxim *local* este necesară rezolvarea condiţiilor de ordinul I şi de ordin II. Aşa cum se observă din experimentele numerice, deşi algoritmii de ordinul

I prezintă o complexitate a iteraţiei foarte scăzută (în comparaţie cu cei de ordin II) şi o convergenţă accelerată în regiunile îndepărtate de punctul de optim, atunci când algoritmul intră în vecinătatea punctului de optim, viteza acestora scade considerabil. De aceea, găsirea unui punct de optim cu o acurateţe mare este un proces dificil pentru metodele de ordin I. În cazul problemelor de dimensiuni foarte mari, când nu este necesară aflarea punctului de optim cu o acurateţe ridicată, recomandarea principală pentru rezolvarea acestora sunt algoritmii de ordin I datorită complexităţii reduse a iteraţiilor acestora. În continuare, prezentăm principalele metode de ordin I şi exemple de funcţionare ale acestora.

3.2 Probleme rezolvate de laborator

3.2.1 Metoda Gradient

Metoda gradient se află printre primele şi cele mai simple metode dezvoltate în scopul determinării unui punct critic aflat pe o anumită curbă (Cauchy, 1847). În principiu, metoda gradient reprezintă un algoritm de ordin I care generează un şir de puncte (vectori) $x_1, x_2, \ldots$, pornind dintr-un punct iniţial ales. Structura esenţială a metodei gradient este enunţată în continuare:

Metoda Gradient

1. Se alege punctul iniţial x_0, $k := 0$.
2. Se determină pasul α_k şi se actualizează $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$.
3. Dacă criteriul de oprire nu este satisfăcut, atunci se incrementează $k := k + 1$ şi se reia pasul 2,

unde $\nabla f(x)$ reprezintă gradientul funcţiei f în punctul x. Pentru alegerea pasului α_k avem mai multe opţiuni:

(i) Alegerea ideală a pasului α_k la fiecare iteraţie presupune ca funcţia scalară $\phi(\alpha) = f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$ să descrească cât mai mult posibil, i.e:

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha > 0} \phi(\alpha),$$

numită şi problema de "line search".
(ii) Deseori, în funcţie de f, minimizarea lui $\phi(\alpha)$ poate fi foarte dificilă. În acest caz, α_k poate fi găsit prin diverşi algoritmi mai simpli de

căutare, ce includ condiţii necesare asupra pasului pentru asigurarea unei descreşteri suficiente a funcţiei. Condiţiile Wolfe reprezintă un exemplu elocvent pentru această strategie de "line-search":

1. Se aleg două constante c_1 şi c_2 ce satisfac $0 < c_1 < c_2 < 1$

2. Se determină $\alpha_k > 0$ astfel încât:

$$f(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) \leq f(x_k) - c_1 \alpha_k \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k) \tag{3.2}$$

$$\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)) \leq c_2 \nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k). \tag{3.3}$$

(iii) Un caz particular des utilizat în practică este "metoda backtracking" ce ajustează dimensiunea pasului α_k pentru ca prima relaţie Wolfe (3.2) să fie satisfăcută; metoda presupune alegerea unui parametru $\rho \in (0, 1]$ şi actualizarea dimensiunii pasului, după cum urmează:

1. Se alege $\alpha_0 > 0, \rho \in (0, 1]$;
2. Cât timp α_k nu satisface prima condiţie Wolfe (3.2) iterăm :
   2.1. $\alpha_{k+1} = \rho \alpha_k; k = k + 1$.

(iv) Pentru funcţiile cu gradient continuu în sens Lipschitz cu o constantă $L > 0$, putem alege pasul α_k constant la fiecare iteraţie. Dacă aplicăm iteraţia metodei gradient, din condiţia continuităţii funcţiilor cu gradient Lipschitz avem:

$$f(x_{k+1}) \leq f(x_k) - \alpha_k (1 - \frac{L}{2} \alpha_k) \left\| \nabla f(x_k) \right\|^2,$$

rezultând că trebuie să selectăm $\alpha_k \in (0, \frac{2}{L})$, iar pentru o descreştere optimă a funcţiei, la fiecare iteraţie alegem $\alpha_k = \frac{1}{L}$.
În exemplul următor vom implementa metoda gradient pentru prima şi a treia dintre opţiunile alegerii pasului α_k, unde criteriul de oprire va fi impus de scăderea termenului $\|\nabla f(x_k)\|$ sub o precizie dată.

Exemplul 15. Fie funcţia $f(x) = (x_1 - 2)^4 + (x_1 - 2x_2)^2$. Să se implementeze metoda gradient pentru rezolvarea problemei:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \tag{3.4}$$

în varianta cu pas ideal şi cea cu pas ales prin metoda de backtracking.

Rezolvare. Pentru început, vom avea nevoie de două funcţii:

```
f=feval_obj(x), g=gradient_obj(x)
```

care să returneze valoarea funcţiei intr-un punct x, respectiv gradientul funcţiei în acel punct. Din moment ce vom căuta pasul ideal la fiecare iteraţie a metodei gradient, va fi necesară o funcţie ce returnează valoarea funcţiei $\phi(\alpha) = f(x + \alpha d)$:

```
function f=phi_obj(alpha,x,d)
  f=feval_obj(x+alpha*d);
end
```

Pentru găsirea pasului ideal la fiecare iteraţie, vom utiliza funcţia `fminsearch`. Vom porni de la un punct iniţial x_0, iar condiţia de oprire a algoritmului va presupune ca norma gradientului să fie sub o anumită toleranţă impusă eps. Implementarea algoritmului este dată de următoarea secvenţă de cod:

```
function xmin=gradient_method(x0,eps)
% Initializam vectori/matrice pentru
% memorarea gradientilor, a punctelor x
% generate de algoritm, etc
puncte_gradient=[]; puncte_iteratie=[];
valori_functie=[]; norme_gradienti=[];
%vom utiliza un vector g pentru a stoca gradientul curent
x=x0; g=gradient_obj(x);
while(norm(g)>eps)
  g=gradient_obj(x); puncte_gradient=[puncte_gradient g];
  puncte_iteratie=[puncte_iteratie x];
  valori_functie=[valori_functie; feval_obj(x)];
  norme_gradienti=[norme_gradienti; norm(g)];
  alpha=fminsearch(@(alpha) phi_obj(alpha,x,-g).1);
  x=x-alpha*g
end
xmin=x;

%Pentru afisarea grafica a rezultatelor,
%avem urmatoarele instructiuni
t=1:length(valori_functie);
figure(1)
hold on
```

```
plot(t,norme_gradienti(t),'k','LineWidth',2);
hold off
figure(2)
hold on
plot(t,valori_functie(t),'k','LineWidth',2);
hold off

%Pentru trasarea liniilor de contur si evolutia
%metodei gradient, avem urmatoarele
%instructiuni
[x1,x2]=meshgrid([1.2:0.01:2.8],[0.4:0.01:1.6]);
z=(x1-2).^4+(x1-2.*x2).^2;
figure(3)
hold on
contour(x1,x2,z,valori_functie);
plot3(puncte_iteratie(1,:),puncte_iteratie(2,:),...
valori_functie,'r');
scatter3(puncte_iteratie(1,:),puncte_iteratie(2,:),...
valori_functie,'filled');
hold off
```

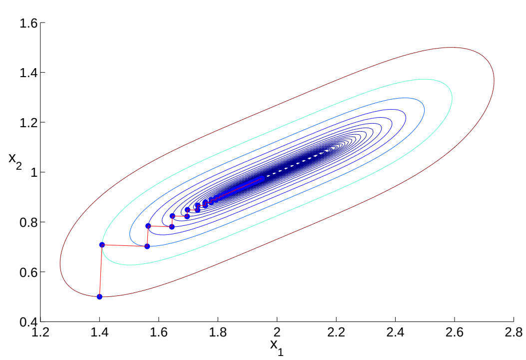

Figura 3.1: *Convergenţa metodei gradient cu pas ideal.*

Apelarea funcţiei precedente se face în linia de comandă din Matlab, e.g.:

```
xmin=gradient_method([1.4;0.5],0.0001)
```

Pentru varianta metodei gradient cu pasul determinat de metoda de backtracking, se poate înlocui în cod funcţia `fminsearch` cu următoarea secvenţă de cod:

```
function alpha=backtrack_alpha(x,d)
  alpha=1; t1=0.9; t2=0.2;
  g=gradient_obj(x);
  %Va trebui satisfacuta conditia Armijo:
  while(feval_obj(x+alpha*d)>feval_obj(x)+t1*alpha*g'*d)
  alpha=alpha*t2;
  end
```

care va fi apelată cu $d = -g = -\nabla f(x)$.

În Fig. 3.1 se observă caracteristica elocventă a metodei gradient care a fost precizată în secţiunile anterioare, şi anume decelerarea ratei de convergenţă pe măsură ce algoritmul se apropie de punctul de optim. În plus, Fig. 3.2 redă rezultatele grafice comparative ale convergenţei metodei gradient când criteriul de oprire este de forma $f(x_k) - f^*$ sau $\|\nabla f(x_k)\|$. Observăm că deşi criteriul $f(x_k) - f^*$ reflectă mult mai bine acurateţea punctului curent, acesta este rar folosit în practică, deoarece valoarea optimă nu se cunoaşte a priori.

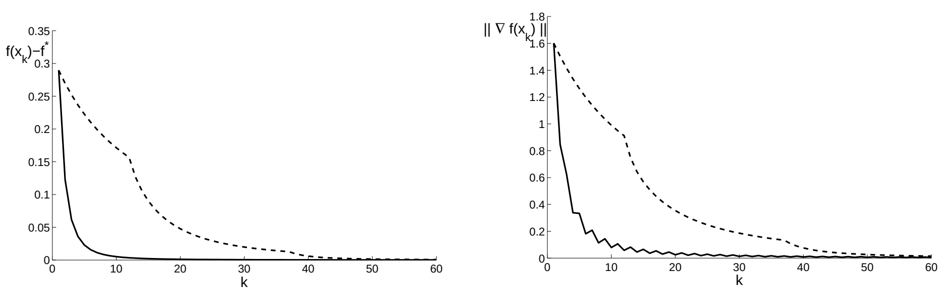

Figura 3.2: *Comparaţia convergenţei variantelor metodei gradient (cu criteriul $f(x_k) - f^*$ în prima figură şi cu criteriul $\|\nabla f(x_k)\|$ în a doua), pentru pas ideal (linie continuă) şi pas obţinut prin backtracking (linie punctată).*

În exemplul următor, vom implementa metoda gradient cu pas constant pentru o funcţie pătratică cu gradient Lipschitz, pentru care $L = \lambda_{max}(Q)$.

Exemplul 16. Fie funcţia pătratică:

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T \begin{bmatrix} 2.04 & -2.8 & 3.3; \\ -2.8 & 6 & -4 \\ 3.3 & -4 & 17.25 \end{bmatrix} x + [1 \ \ –1 \ \ –2] x$$

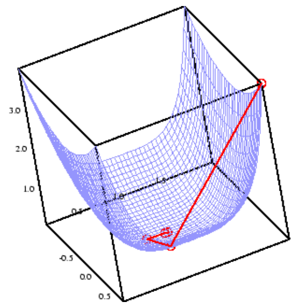

Figura 3.3: *Progresul metodei gradient pornind dintr-un punct iniţial ales aleatoriu, spre punctul de optim.*

Să se implementeze metoda gradient pentru rezolvarea problemei:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^3} f(x).$$

Rezolvare. Implementarea metodei gradient din cerinţa precedentă este dată de următoarea secvenţă de cod:

```
function [x,f,iter]=gradient(eps)
Q=[2.04   -2.8    3.3;...
   -2.8    6      -4;...
    3.3   -4      17.25];
q=[1;-1;-2];

L=max(eig(Q)); x=rand(3,1);
grad=Q*x+q;
f_new=0.5*x'*Q*x+q'*x; f_old=f_new+1; iter=0;

while ((f_old-f_new)>eps)
f_old=f_new; x=x-(1/L)*grad;
grad=Q*x+q; f_new=0.5*x'*Q*x+q'*x;
iter=iter+1;
end
f=f_new;
end
```

Să se rezolve sistemul $Qx = -q$ şi să se compare soluţia acestuia cu cea a problemei anterioare. Să se comenteze observaţiile făcute.

3.2.2 Metoda gradienţilor conjugaţi

Metoda gradienţilor conjugaţi face parte, de asemenea, din clasa metodelor de optimizare de ordinul I şi reprezintă o metodă iterativă cu perfor-
manţe deosebite în rezolvarea problemelor pătratice. A fost dezvoltată de către Hestenes şi Stiefel în 1951, în scopul rezolvării sistemelor de ecuaţii liniare de mari dimensiuni. Deoarece orice problemă de rezolvare a unui sistem de ecuaţii liniare/neliniare se poate transforma într-o problemă de optimizare pătratică, metoda gradienţilor conjugaţi este considerată o metodă de optimizare. Vom observa că iteraţia are aproximativ aceeaşi complexitate ca şi cea a metodei gradient, însă foloseşte un alt raţionament pentru a converge la punctul de optim.

Metoda gradienţilor conjugaţi

1. Se alege $\alpha_0 > 0, x_0$ şi se calculează $d_0 = -\nabla f(x_0)$.
2. Se actualizează şirurile $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ si $d_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k d_k$.
3. Dacă criteriul de oprire nu este satisfăcut, atunci se incrementează $k = k + 1$ şi se reia pasul 2,

unde $\nabla f(x)$ reprezintă gradientul funcţiei f în punctul x, iar $r_k = \nabla f(x_k)$. Parametrii α_k şi β_k sunt definitorii pentru metoda direcţiilor conjugate, variantele de alegere a acestora reprezentând elemente fundamentale ale dezvoltării de noi metode de direcţii (gradienţi) conjugate (conjugaţi). Cea mai des folosită variantă a metodei de direcţii conjugate pentru funcţii pătratice este dată de

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T d_k}{d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k}, \qquad \beta_k = \frac{r_{k+1}^T \nabla^2 (f x_k) d_k}{d_k^T \nabla^2 f(x_k) d_k}$$

Exemplul 17. Să se determine punctul de optim şi valoarea optimă a funcţiei pătratice $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ definită de:

$$f(x) = 4.5x_1^2 + 5x_2^2 + 3x_1x_2 - 2x_1 - x_2,$$

utilizând metoda gradienţilor conjugaţi cu punctul iniţial $x_0 = [0\ 0]^T$.

Rezolvare. Rescriem funcţia f în formă matriceală:

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

unde $Q = \begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 3 & 10 \end{bmatrix}, q^T = \begin{bmatrix} -2 & -1 \end{bmatrix}$. Cunoaştem că pentru a rezolva probleme pătratice de dimensiune n cu ajutorul metodei gradienţilor conjugaţi sunt necesare n iteraţii ale acestei metode. De aceea, problema din enunţ poate fi rezolvată în două iteraţii de această metodă. Având la dispoziţie gradientul $\nabla f(x_0)$ şi direcţia d_0, putem calcula:

$$\alpha_0 = -\frac{\nabla f(x_0)^T d_0}{d_0^T Q d_0}.$$

Prima iteraţie din şirul x_k al metodei de gradienţi conjugaţi se calculează pe baza informaţiei acumulate până în momentul $k = 1$:

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0.$$

La a doua şi ultima iteraţie, pentru calculul lui x_2 avem nevoie de direcţia $d_1 = -\nabla f(x_1) + \beta_0 d_0$, unde $\beta_0 = \frac{\nabla f(x_1)^T Q d_0}{d_0^T Q d_0}$. În final, pentru calculul lui x_2 este necesar parametrul $\alpha_1 = -\frac{\nabla f(x_1)^T d_1}{d_1^T Q d_1}$ şi rezultă:

$$x_2 = x_1 - \alpha_1 d_1.$$

Deoarece metoda gradienţilor conjugaţi are nevoie de două iteraţii în cazul nostru, iteraţia x_2 reprezintă soluţia problemei de minimizare. Ştiind că soluţia problemei satisface, de asemenea, şi sistemul liniar de ordin II:

$$Qx + q = 0,$$

obţinem şi un criteriu de verificare pentru soluţia returnată de algoritmul de gradienţi conjugaţi. O implementare în cod Matlab este dată de următoarea secvenţă:

```
 function [x f]=conjugate()
Q=[9 3;3 10]; q=[-2;-1];
x=[0;0]; f_new=0.5*x'*Q*x+q'*x;
f=f_new+1; grad=Q*x+q;

iter=0; d=-grad;
while (iter<2)
f=f_new; alpha=-(grad'*d)/(d'*Q*d);
x=x+alpha*d; grad=Q*x+q;
beta=(grad'*Q*d)/(d'*Q*d);
```

```
d=-grad+beta*d; f_new=0.5*x'*Q*x+q'*x;
iter=iter+1;
end
f=f_new;
end
```

Experimentele numerice au condus la concluzia că pentru o funcţie pătratică convexă $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, metoda gradienţilor conjugaţi converge în *n iteraţii.* Observăm un comportament deosebit al acestei metodě, deoarece în general, majoritatea metodelor cunoscute converg într-un *număr infinit de iteraţii.*

3.3 Probleme rezolvate de seminar

3.3.1 Aproximări pătratice

Problema 1. Fie funcţia $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)e^{(x_1^2 - x_2^2)}$.

(i) Să se verifice că punctul $x^* = [0 \quad 0]^T$ este un punct de minim local.

(ii) Să se evalueze gradientul şi Hessiana în punctul $x_0 = [1\ 1]^T$ şi să se verifice că Hessiana nu este pozitiv definită. Să se arate că $\nu = 3$ este valoarea întreagă minimă pentru care $H = \nabla^2 f(x_0) + \nu I \succ 0$.

(iii) Fie punctul $x_0 = [1/2 \quad 0]^T$. Să se scrie aproximarea pătratică uzuală (serie Taylor) a acestei funcţii in jurul lui x_0 şi o aproximare pătratică utilizând în locul Hessianei o matrice $\frac{1}{\beta}I$, cu $\beta > 0$. Minimizaţi ambele aproximări.

Rezolvare. (i) Gradientul şi Hessiana funcţiei vor fi:

$$\nabla f(x) = e^{(x_1^2 - x_2^2)} \begin{bmatrix} x_1^3 + x_1(1 + x_2^2) \\ -x_2^3 + x_2(1 - x_1^2) \end{bmatrix}$$
$$\nabla^2 f(x) = e^{(x_1^2 - x_2^2)} \begin{bmatrix} 2x_1^4 + x_1^2(5 + 2x_2^2) + x_2^2 + 1 & -2x_1x_2(x_1^2 + x_2^2) \\ -2x_1x_2(x_1^2 + x_2^2) & 2x_2^4 + x_2^2(2x_1^2 - 5) - x_1^2 + 1 \end{bmatrix}.$$

Evident, pentru $x^* = 0$ este punct de minim local deoarece satisface condiţiile suficiente de optimalitate:

$$\nabla f(x^*) = 0, \quad \nabla^2 f(x^*) = I_2 \succ 0.$$

(ii) Pentru $x_0 = [1 \quad 1]^T$ avem:

$$\nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}, \ \nabla^2 f(x_0) = \begin{bmatrix} 12 & -4 \\ -4 & -1 \end{bmatrix},$$

de unde rezultă că valorile proprii ale lui $\nabla^2 f(x_0)$ sunt $\lambda_{1,2} = \frac{11 \pm \sqrt{233}}{2} \approx (13.13, -2.13)$, i.e. matricea nu este pozitiv definită. Mai mult, observăm că $(\nabla^2 f(x^0) + \nu I) \succ 0$ pentru $\nu = 3 > \lambda_2 \approx -2.13$.
(iii) Pentru punctul $x_0 = [1/2 \quad 0]^T$ vom avea:

$$\nabla f(x_0) = e^{\frac{1}{4}} \begin{bmatrix} \frac{5}{8} \\ 0 \end{bmatrix}, \ \nabla^2 f(x_0) = e^{\frac{1}{4}} \begin{bmatrix} \frac{19}{8} & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} \end{bmatrix}.$$

Aproximarea în serie Taylor a funcţiei în jurul punctului $x_0 = [1/2 \quad 0]^T$ va fi:

$$\begin{aligned} f(x) \approx & f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0) \\ = & e^{\frac{1}{4}} \left(\frac{19}{16} x_1^2 + \frac{3}{4} x_2^2 - \frac{9}{16} x_1 + \frac{9}{64} \right), \end{aligned}$$

al cărei punct de minim este dat de $x_1^N = [9/38 \quad 0]^T$. Aproximarea cu $\frac{1}{\beta} I$ are următoarea formă:

$$f(x) \approx f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \frac{1}{\beta} I_2 (x - x_0)$$

care în acest caz este dată de:

$$\begin{aligned} f(x) \approx &= \frac{1}{8} e^{\frac{1}{4}} + e^{\frac{1}{4}} \begin{bmatrix} \frac{5}{8} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 - \frac{1}{2} \\ x_2 \end{bmatrix} + \frac{1}{2\beta} \begin{bmatrix} x_1 - \frac{1}{2} & x_2 \end{bmatrix}^T I_2 \begin{bmatrix} x_1 - \frac{1}{2} \\ x_2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{8} e^{\frac{1}{4}} + \frac{1}{2\beta} \left((x_1 - \frac{1}{2})^2 + x_2^2 \right) + \frac{5}{8} e^{\frac{1}{4}} \left(x_1 - \frac{1}{2} \right), \end{aligned}$$

de unde rezultă punctul de minim $x_1^G = [-\frac{5\beta}{8} e^{\frac{1}{4}} + \frac{1}{2} \quad 0]^T$. Observăm că putem alege $\beta = \frac{8}{19 e^{\frac{1}{4}}}$ astfel încât $x_1^G = x_1^N$, iar $f(x_1^N) = f(x_1^G)$. În cazul general însă, obţinem puncte x_1^G şi x_1^N pentru care $f(x_1^G) > f(x_1^N)$.

3.3.2 Condiţii de optimalitate de ordin I

Problema 2. Rezolvaţi problema de maximizare:

$$\max_{x,y} \ f(x, y) = \frac{1}{(x - a)^2 + (y - a)^2 + 1}.$$

Să se discute rezultatul în funcţie de a.

Rezolvare. Prin aplicarea condiţiilor suficiente de ordin I, i.e. $\nabla f(x,y) = 0$, obţinem sistemul:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x} & = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} & = 0 \end{cases}$$

Explicitând cele două ecuaţii, obţinem:

$$\begin{cases} x - a & = 0 \\ y - a & = 0. \end{cases}$$

În concluzie, există un singur punct critic dat de perechea (a, a). Mai departe, demonstrăm că punctul critic este punct de maxim. Verificăm condiţiile suficiente de ordin II, i.e. Hessiana $\nabla^2 f(x)$ în punctul (a, a) este o matrice negativ definită,

$$\nabla^2 f(a,a) = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}.$$

şi constatăm că punctul (a, a) este punct de maxim, indiferent de valoarea parametrului a.

Problema 3. Fie funcţia $f(x_1, x_2) = 11x_1^2 + 20x_1x_2 + \alpha x_2^2 - 2x_1 - 2x_2 + 2$.

(i) Să se discute care sunt punctele de minim locale în funcţie de α.

(ii) Pentru ce valori ale lui α, funcţia are valoarea minimă egală cu 2?

Rezolvare. (i) Observăm că $f(x_1, x_2)$ este funcţie pătratică:

$$\begin{aligned} f(x_1,x_2) &= \frac{1}{2}x^T Q x + q^T x + r \\ &= \frac{1}{2}[x_1 \quad x_2]\begin{bmatrix} 22 & 20 \\ 20 & 2\alpha \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + [-2 \quad 2]\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + 2, \end{aligned}$$

unde $Q = \begin{bmatrix} 22 & 20 \\ 20 & 2\alpha \end{bmatrix}, q = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \end{bmatrix}^T, r = 2$. Punctele staţionare ale funcţiei f sunt soluţii ale sistemului:

$$\nabla f(x_1, x_2) = Qx + q = \begin{bmatrix} 22x_1 + 20x_2 - 2 \\ 20x_1 + 2\alpha x_2 - 2 \end{bmatrix} = 0. \tag{3.5}$$

Un factor ce determină natura punctelor staţionare este convexitatea funcţiei f. Una din modalităţile de verificare a proprietăţii de convexitate

presupune $\nabla^2 f(x) = Q \succeq 0$, pentru orice $x \in \mathrm{dom} f$. Valorile proprii ale matricei Q sunt rădăcinile polinomului caracteristic $\lambda^2 - \lambda(22 + 2\alpha) + 44\alpha + 400 = 0$. Astfel, discutăm convexitatea funcţiei f după α:
Dacă $\alpha > \frac{100}{11}$, funcţia f este convexă şi orice soluţie a sistemului (3.5) este un punct de minim global. Rezolvând sistemul, obţinem $x_1^* = \frac{-1}{11\alpha - 100}(10 - \alpha)$, $x_2^* = \frac{1}{11\alpha - 100}$

Dacă $\alpha = \frac{100}{11}$ sistemul (3.5) nu are soluţie şi este definit de ecuaţiile:

$$\begin{aligned} &20x_1 + \frac{200}{11}x_2 - 2 = 0,\\ &22x_1 + 20x_2 - 2 = 0 \end{aligned}$$

În acest caz, f este convexă, dar nu există punct de minim, i.e. $q \notin \mathrm{Im}(Q)$.

Dacă $\alpha < \frac{100}{11}$, funcţia f nu este convexă deoarece matricea Q este indefinită. Punctul critic obţinut în acest caz din rezolvarea sistemului (3.5) este punct de inflexiune (staţionar).
(ii) Impunem condiţia ca punctul (x^*, y^*) să fie punct critic, i.e.

$$\nabla f(x_1, x_2) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} x_1^* = \frac{-1}{11\alpha - 100}(10 - \alpha) \\ x_2^* = \frac{1}{11\alpha - 100}. \end{cases}$$

Pentru a determina un punct de minim, ţinem cont de condiţia de la punctul precedent $\alpha > \frac{100}{11}$. Înlocuind valorile lui x_1^*, respectiv x_2^* în

$$f\left(\frac{\alpha - 10}{11\alpha - 100}, \frac{1}{11\alpha - 100}\right) = 2,$$

se determină uşor valoarea scalarului α.

3.3.3 Metoda gradient

Problema 4. Fie funcţia $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|_2^2 + 2x^T x$, unde $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ şi $b = [0\ 1]^T$. Considerăm de asemenea problema de optimizare aferentă: $\min\limits_{x \in \mathbb{R}^2} f(x)$.

(i) Să se scrie problema de optimizare aferentă ca o problemă QP. Să se calculeze expresia gradientului şi Hessianei funcţiei obiectiv. Să se demonstreze că funcţia obiectiv este convexă.

(ii) Să se calculeze punctul de minim global x^*. Pornind din punctul inițial $x_0 = [0 \quad 1]^T$, să se implementeze prima iterație x_1 a metodei gradient cu pasul $\alpha_0 = 1$. Să se compare $f(x_0)$, $f(x_1)$ și $f(x^*)$ și să se discute concluzia.

Rezolvare. (i) Pentru a scrie problema anterioară ca o problemă QP, explicităm mai întâi norma din cadrul funcției obiectiv:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 &= \frac{1}{2}(Ax-b)^T(Ax-b)\\ &= \frac{1}{2}(x^TA^TAx - x^TA^Tb - b^TAx + b^Tb)\\ &= \frac{1}{2}x^TA^TAx - (A^Tb)^Tx + \frac{b^Tb}{2}\end{aligned}$$

Formulând $2x^Tx$ ca $\frac{1}{2}x^T4I_2x$ avem:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} \frac{1}{2}x^TQx + q^Tx + c$$

unde $Q = A^TA + 4I_2$, $q = -A^Tb$ și $c = \frac{1}{2}b^Tb$. Se pot determina ușor parametrii:

$$Q = \begin{bmatrix} 6 & 2\\ 2 & 6\end{bmatrix}, \quad q = \begin{bmatrix} -1\\ -1\end{bmatrix}.$$

Deoarece Q este simetrică, expresia gradientului și a Hessianei sunt definite de:

$$\nabla f(x) = Qx + q = \begin{bmatrix} 6x_1 + 2x_2 - 1\\ 2x_1 + 6x_2 - 1\end{bmatrix} \quad \text{și} \quad \nabla^2 f(x) = Q$$

Funcția f este de două ori diferențiabilă, deci putem folosi condiția de ordin II pentru a arăta convexitatea. Mai exact, verficăm dacă $\nabla^2 f(x) \geq 0$ pentru orice $x \in \mathrm{dom}f$. Valorile proprii ale matricei Q sunt soluții ale polinomului caracteristic:

$$\lambda^2 - 12\lambda + 32 = 0,$$

date de $\lambda_{1,2} = \{8, 4\}$, i.e. matricea Q este pozitiv definită.
(ii) Funcția f este convexă, deci condițiile de optimalitate de ordin I sunt suficiente pentru a determina punctul de optim:

$$\nabla f(x^*) = Qx^* + q = 0.$$

Evident, soluţia $x^* = -Q^{-1}q$ este determinată de $Q^{-1} = \frac{1}{32}\begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix}$ rezultând:

$$x^* = \frac{1}{32}\begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{32}\begin{bmatrix} 4 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} \end{bmatrix}$$

Implementarea primei iteraţii a metodei gradient presupune calculul vectorului $\nabla f(x_0)$:

$$\nabla f(x_0) = Qx_0 + q = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

Astfel, iteraţia x_1 rezultă:

$$x_1 = x_0 - \alpha_0 \nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} 0 \\ -4 \end{bmatrix}$$

Observăm că $f(x_1) = 52$ şi $f(x^*) = -\frac{1}{8}$, deci x_1 se află într-o regiune relativ îndepărtată a optimului x^*. În plus, remarcăm că valoarea funcţiei în x_1 este mai mare faţă de cea în x_0, i.e. $f(x_0) = 2$. Reamintim că aplicarea metodei gradient unei probleme cu funcţia obiectiv cu gradient continuu în sens Lipschitz (cu constanta L) presupune alegerea pasului $\alpha \in \left(0, \frac{2}{L}\right)$. În particular, $L = \lambda_{\max}(Q) = 8$ şi conform teoriei $\alpha_0 \in (0, 0.25]$; deci, $\alpha_0 = 1$ ales anterior este inadecvat.

Problema 5. Fie funcţia $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^2 - 4x_1x_2 + x_1$, punctul iniţial $x_0 = [-\frac{1}{8}\ 0]^T$ si direcţia $d_0 = -[\frac{1}{5}\ \ \frac{2}{5}]^T$.

(i) Este d_0 o direcţie de descreştere?

(ii) Notând $\phi(\alpha) = f(x_0 + \alpha d_0)$, să se găsească valoarea $\phi'(1)$.

(iii) Să se calculeze prima iteraţie x_1 a metodei gradient (cu alegere ideală a dimensiunii pasului).

Rezolvare. (i) Pentru ca direcţia d_k să fie direcţie de descreştere, trebuie să satisfacă inegalitatea $\nabla f(x_k)^T d_k < 0$. Din expresia gradientului funcţiei f:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 8x_1 - 4x_2 + 1 \\ 6x_2 - 4x_1 \end{bmatrix},$$

care în punctul x_0 este $\nabla f(x_0) = [0\ 1/2]^T$, observăm că $\nabla f(x_0)^T d_0 = -1/5$. Deci direcţia d_0 este direcţie de descreştere.

(ii) Pentru calculul derivatei lui $\phi(\alpha)$ rescriem f sub formă:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + q^T x, \quad \text{unde } Q = \begin{bmatrix} 8 & -4 \\ -4 & 6 \end{bmatrix} \text{ şi } q = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Explicităm $\phi(\alpha)$:

$$\phi(\alpha) = \frac{\alpha^2}{2} d_0^T Q d_0 + \alpha(Qx_0 + q)^T d_0 + \frac{1}{2} x_0^T Q x_0 + q^T x_0,$$

şi deducem derivata în 1:

$$\phi'(1) = d_0^T Q d_0 + (Qx_0 + q)^T d_0 = 0.44.$$

(iii) Substituind valorile parametrilor din enunţ, problema găsirii dimensiunii ideale a pasului metodei gradient se reduce la minimizarea unei funcţii scalare pătratice convexe. Rezultă astfel $\min_{\alpha \geq 0} \phi(\alpha) = -0.0833$ şi $\alpha^* = \arg\min_{\alpha \geq 0} \phi(\alpha) = 0.1667$. În final, calculăm prima iteraţie a metodei gradient:

$$x_1 = x_0 - \alpha^* \nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} -0.1250 \\ -0.0833 \end{bmatrix}.$$

Problema 6. Fie problema de minimizare:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} f(x) \ (:= 5x_1^2 + 5x_2^2 - x_1 x_2 - 11x_1 + 11x_2 + 11).$$

(i) Să se găsească punctele critice.

(ii) Să se demonstreze că un punct ce satisface condiţiile de ordin I este, de asemenea, punct de minim global.

(iii) Care este rata de descreştere a metodei gradient pentru această funcţie ?

(iv) Pornind din punctul iniţial $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, câte iteraţii sunt necesare pentru ca algoritmul să atingă acurateţea 10^{-6}?

Rezolvare. (i) Punctele critice reprezintă soluţiile sistemului $\nabla f(x) = 0$ descris de:

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 - 11 = 0 \\ -x_1 + 10x_2 + 11 = 0. \end{cases}$$

Observăm că sistemul are o singură soluţie dată de perechea $(x_1, x_2) = (1, -1)$.
(ii) Observăm că funcţia f în forma:

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}[x_1 \quad x_2] \begin{bmatrix} 10 & -1 \\ -1 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + [-11 \quad 11] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + 11.$$

are Hessiana pozitiv definită în orice punct al domeniului, i.e.

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 10 & -1 \\ -1 & 10 \end{bmatrix} = Q \succ 0.$$

În concluzie, punctul critic $(x_1^*, x_2^*) = (1, -1)$ este punct de minim global.
(iii) Pentru calculul ratei de descreştere corespunzătoare metodei gradient explicităm iteraţia acesteia:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \alpha_k \nabla f(x_k) \\ &= x_k - \alpha_k (Q x_k + q) \\ &= x_k - \alpha_k Q x_k - \alpha_k q \\ &= (I_2 - \alpha_k Q) x_k - \alpha_k q, \end{aligned}$$

unde cu I_2 am notat matricea identitate de ordin II. Considerăm metoda gradient cu pasul constant dat de $\alpha_k = \frac{1}{L}$, unde L reprezintă constanta de continuitate Lipschitz a gradientului funcţiei obiectiv.
Reamintim acum relaţia de continuitate în sens Lipschitz a gradientului unei funcţii diferenţiabile: o funcţie $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ are gradientul continuu Lipschitz cu constanta L dacă

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L \|x - y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

În cazul funcţiei din enunţ, relaţia se reduce la:

$$\|Qx - Qy\| \leq \|Q\| \|x - y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^2,$$

deci putem considera constanta Lipschitz $L = \|Q\| = \lambda_{\max}(Q)$, unde $\lambda_{\max}(Q)$ reprezintă valoarea proprie maximă a lui Q. Observând că în cazul nostru $\lambda_{\max}(Q) = L = 11$, considerăm pasul constant $\alpha_k = \frac{1}{11}$.
Folosind notaţia $x^* = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$, din condiţiile de ordinul I avem $Qx^* = -q$,

de aceea putem reformula iteraţia în următorul mod:

$$\begin{aligned}
x_{k+1} - x^* &= x_k - \frac{1}{11}(Qx_k + q) - x^* \\
&= x_k - \frac{1}{11}(Qx_k - Qx^*) - x^* \\
&= \left(I_2 - \frac{1}{11}Q\right)(x_k - x^*) \\
&\vdots \\
&= \left(I_2 - \frac{1}{11}Q\right)^k (x_0 - x^*).
\end{aligned}$$

De aici se poate deriva uşor rata de descreştere a metodei gradient:

$$\begin{aligned}
\|x_{k+1} - x^*\| &= \| \left(I_2 - \frac{1}{11}Q\right)^k (x_0 - x^*)\| \\
&\leq \|\left(I_2 - \frac{1}{11}Q\right)^k \|\|x_0 - x^*\| \\
&= \|I_2 - \frac{1}{11}Q\|^k \|x_0 - x^*\|.
\end{aligned}$$

În concluzie, metoda gradient are rata de descreştere liniară (pentru funcţia din enunţ) cu factorul $\|I_2 - \frac{1}{11}Q\|$.
(iv) Din punctul anterior, avem rata de convergenţă a şirului generat de metoda gradient cu pas constant:

$$\|x_k - x^*\| \leq \|I_2 - \frac{1}{11}Q\|^k \|x_0 - x^*\|. \tag{3.6}$$

Calculând norma Euclidiană (norma 2), avem:

$$\left\|I_2 - \frac{1}{11}Q\right\| = \left\|\begin{bmatrix} \frac{1}{11} & \frac{1}{11} \\ \frac{1}{11} & \frac{1}{11} \end{bmatrix}\right\| = \frac{2}{11}.$$

Înlocuind în (3.6) inclusiv valorile pentru x_0 si x^*, avem:

$$\|x_k - x^*\| \leq \sqrt{2}\left(\frac{2}{11}\right)^k.$$

Pentru ca şirul x_k să se apropie de punctul de optim x^* cu acurateţea 10^{-6}, trebuie să asigurăm inegalitatea $\sqrt{2}\left(\frac{2}{11}\right)^k \leq 10^{-6}$. În concluzie, prin extragerea logaritmului din ambele părţi, avem nevoie de un număr de iteraţii:

$$k \geq \frac{\sqrt{2}\log 10^6}{\log 11 - \log 2}.$$

Problema 7. Să se determine extremele funcţiei $f(x_1, x_2) = x_1^3 x_2^2 (a - x_1 - x_2)$. Pentru ce valori ale lui a, funcţia f are un punct de maxim global?

Rezolvare. Obţinem punctele de extrem ale funcţiei rezolvând sistemul dat de condiţiile de ordin I, i.e. $\nabla f(x_1, x_2) = 0$. Mai exact, sistemul are forma:

$$\begin{cases} 3x_1^2 x_2^2 (a - x_1 - x_2) - x_1^3 x_2^2 = 0 \\ 2x_1^3 x_2 (a - x_1 - x_2) - x_1^3 x_2^2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^2 x_2^2 (3a - 4x_1 - 3x_2) = 0 \\ x_1^3 x_2 (2a - 2x_1 - 3x_2) = 0, \end{cases}$$

de unde putem deduce trei cazuri diferite:

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 \text{ oarecare} \end{cases} \text{sau} \begin{cases} x_1 \text{ oarecare} \\ x_2 = 0 \end{cases} \text{sau} \begin{cases} 3a - 4x_1 - 3x_2 = 0 \\ 2a - 2x_1 - 3x_2 = 0 \end{cases}.$$

Componentele Hessianei $\nabla^2 f(x_1, x_2)$ vor fi:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = 2x_1 x_2^2 (3a - 6x_1 - 3x_2), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} = x_1^3 (2a - 2x_1 - 5x_2)$$
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} = x_1^2 x_2 (6a - 8x_1 - 9x_2),$$

Constatăm că în primele două cazuri, $x_1 = 0$ sau $x_2 = 0$, matricea

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

este nedefinită. Pentru ultimul caz însă, obţinem $x_1 = \frac{a}{2}$ şi $x_2 = \frac{a}{3}$. Astfel, observăm că:

$$\nabla^2 f\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{3}\right) = \begin{bmatrix} \frac{-a^4}{9} & \frac{-a^3}{4} \\ \frac{-a^3}{4} & \frac{-a^4}{12} \end{bmatrix}$$

iar parametrul a condiţionează natura punctului critic $(\frac{a}{2}, \frac{a}{3})$. În final, pentru ca acesta să fie un punct de maxim este necesar ca $\nabla^2 f\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{3}\right) \preceq 0$, i.e. $a \in \left[-\frac{3}{2}, 0\right)$.

Problema 8. Fie funcţia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convexă şi diferenţiabilă. Să se deducă iteraţia metodei gradient cu pas constant $\alpha = \frac{1}{5}$ prin intermediul aproximării Taylor pătratice cu Hessiana $5I_n$.

Rezolvare. În orice punct al domeniului acesteia, funcţia f se poate aproxima cu o formă pătratică după cum urmează:

$$f(x) \approx f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) + \frac{\beta}{2}\|x - \bar{x}\|^2,$$

oricare ar fi $\bar{x} \in \mathrm{dom} f$ şi $\beta \geq 0$. Precizăm că partea dreaptă a expresiei anterioare se numeşte *aproximarea pătratică a funcţiei f în punctul $\bar{x}$ cu Hessiana βI_n.*
Iteraţia metodei gradient cu pas constant α se deduce din minimizarea, la fiecare pas k, a aproximării pătratice cu Hessiana $\frac{1}{\alpha} I_n$:

$$x_{k+1} = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^n} f(x_k) + \nabla f(x_k)^T(y - x_k) + \frac{1}{2\alpha}\|y - x_k\|^2.$$

Observând că se presupune minimizarea unei funcţii convexe, determinăm minimul explicit prin intermediul condiţiilor de optimalitate de ordin I:

$$\nabla f(x_k) + \frac{1}{\alpha}(y^* - x_k) = 0,$$

de unde în final deducem:

$$x_{k+1} = y^* = x_k - \alpha \nabla f(x_k).$$

3.4 Probleme propuse

Problema 1. Fie funcţia $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ f(x) = \frac{1}{2}\left[x^T x + \frac{1}{2}(a^T x)^2\right]$. Să se deducă numărul de flopi necesari pentru calcularea următoarelor elemente: $f(x), \nabla f(x), \nabla^2 f(x)$ şi $\nabla^2 f(x) d$, unde $d \in \mathbb{R}^n$ este un vector oarecare.

Problema 2. Pentru următoarele funcţii determinaţi toate punctele staţionare şi verificaţi dacă acestea sunt puncte de minim local prin utilizarea condiţiilor suficiente de optimalitate de ordinul II:

(i) $f(x) = 3x_1 + \frac{100}{x_1 x_2} + 5x_2$,

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

(iii) $f = \frac{x_1 + x_2}{3 + x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2}$.

Problema 3. Fiind dată funcţia $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 25x_2^2$ şi un punct $x_0 = [5 \quad 1]^T$, se cere:

(i) Să se construiască explicit $\phi(\alpha)$ de-a lungul celei mai abrupte pante, i.e. $\phi(\alpha) = f(x_0 - \alpha \nabla f(x_0))$.

(ii) Să se minimizeze $\phi(\alpha)$ în funcţie de α şi să se obţină un nou punct x_1 utilizând iteraţia metodei gradient.

Problema 4. Să se aplice metoda gradienţilor conjugaţi pentru minimizarea neconstrânsă funcţiei definite în problema rezolvată 5. Să se verifice în două moduri validitatea punctului de optim obţinut.

Problema 5. Fie o matrice $Q \succ 0$. Să se demonstreze inegalitatea lui Kantorovich definită de următoarea relaţie:

$$\frac{(x^T x)^2}{(x^T Q x)\,(x^T Q^{-1} x)} \geq \frac{4\lambda_{\max}(Q)\lambda_{\min}(Q)}{[\lambda_{\max}(Q) + \lambda_{\min}(Q)]^2}.$$

Problema 6. Să se discute valorile parametrului n astfel încât funcţia $f(x_1, x_2) = x_1^n + x_2^n - x_1 x_2 n$ să aibă puncte de extrem local.

Problema 7. Fie funcţia $f(x) = x_1^4 + x_1 x_2 + (1 + x_2)^2$. Definim modelul pătratic:

$$q_f(x; x_0) = f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), x - x_0 \rangle + \frac{1}{2\alpha}\|x - x_0\|^2.$$

Se observă că iteraţia metodei gradient cu dimensiunea pasului α este punctul de minim al formei pătratice anterioare, i.e.

$$\begin{aligned} x_1 &= x_0 - \alpha \nabla f(x_0) \\ &= \arg\min_{y \in \mathbb{R}^2} f(x_0) + \langle \nabla f(x_0), y - x_0 \rangle + \frac{1}{2\alpha}\|y - x_0\|^2. \end{aligned}$$

(i) Pentru $x_0 = [0 \ 0]^T$, să se calculeze $\nabla f(x_0)$ si $\nabla^2 f(x_0)$ şi să se demonstreze că $\nabla^2 f(x_0)$ nu este pozitiv definită.

(ii) Pentru $x_0 = [1 \ -1]^T$, să se calculeze prima iteraţie a metodei de gradient cu pasul $\alpha = 1$.

Problema 8. Fie funcţia $f(x) = x_1^2+2x_2^2+4x_1+4x_2$. Să se demonstreze prin inducţie că metoda gradient cu pasul ideal, pornind din $x_0 = [0\ 0]^T$, generează şirul dat de:

$$x_{k+1} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3^k} - 2 \\ \left(-\frac{1}{3}\right)^k - 1 \end{bmatrix}.$$

Să se deducă punctul de minim din şirul rezultat.

Problema 9. Să se găsească punctele critice ale funcţiei:

$$f(x) = 2x_1^3 - 3x_1^2 - 6x_1x_2(x_1 - x_2 - 1).$$

Care din aceste puncte sunt minime locale, maxime locale sau niciuna din variante?

Problema 10. Pentru problema de optimizare:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} 4x_1^2 - 4x_1x_2 + 2x_2^2,$$

să se aplice primele trei iteraţii ale metodei gradient cu pasul ales în mod ideal.

Problema 11. Considerăm următoarea iteraţie tip metodă gradient:

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

unde s este un pas constant, e_k este o eroare ce satisface $\|e_k\| \leq \delta$ pentru orice k, iar f este funcţia pătratică pozitiv definită:

$$f(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^TQ(x - x^*)$$

Fie $q = \max\{|1 - sm|, |1 - sM|\}$, unde m şi M sunt cea mai mică, respectiv cea mai mare valoare proprie a lui Q. Presupunem că $q < 1$. Să se demonstreze că pentru orice k avem:

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{s\delta}{1 - q} + q^k\|x_0 - x^*\|$$

Capitolul 4

Metode de ordinul II

4.1 Preliminarii

În acest capitol considerăm, de asemenea, probleme generale de optimizare neconstrânsă de forma (3.1). Dacă metodele de ordinul I expuse în capitolul anterior se bazează pe informaţia de gradient a funcţiei obiectiv, în următoarele secţiuni analizăm algoritmi ce fac uz în plus şi de informaţia de ordinul II, şi anume matricea Hessiană a funcţiei obiectiv (vezi [1, 3]). În cele ce urmează prezentăm pe scurt condiţiile de optimalitate necesare şi suficiente pentru probleme de optimizare fără constrângeri (restricţii) (3.1).
Condiţiile necesare de optimalitate pentru problemele neconstrânse pot fi enunţate astfel: orice punct de minim local $x^* \in \text{dom} f$ al problemei (3.1) satisface $\nabla f(x^*) = 0$. De asemenea, *condiţiile necesare de ordinul II* se pot formula după cum urmează: orice punct de minim local $x^* \in \text{dom} f$ al problemei (UNLP) satisface:

$$\nabla f(x^*) = 0 \text{ şi } \nabla^2 f(x^*) \succeq 0.$$

Atribuim o importanţă majoră *condiţiilor de optimalitate suficiente* de ordinul II deoarece reprezintă o modalitate de verificare a naturii unui punct dat: dacă x^* satisface

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{şi} \quad \nabla^2 f(x^*) \succ 0,$$

atunci x^* este un punct strict de minim local al problemei (3.1). Intuitiv, dacă algoritmii de ordinul I rezolvă condiţiile necesare de ordinul I cu ajutorul informaţiei de gradient, putem argumenta că cei de ordinul II converg la un punct de minim local ce satisface condiţiile de ordinul I şi II, utilizând în plus matricea Hessiană a funcţiei obiectiv. În continuare, prezentăm principalele metode de ordinul II şi analizăm comportamentul acestora pe exemple numerice.

Metoda Newton reprezintă una dintre cele mai vechi metode de optimizare, dezvoltată iniţial în scopul aproximării iterative a soluţiilor ecuaţiilor neliniare. Această metodă utilizează inversa matricei Hessiane a funcţiei obiectiv pentru o convergenţă rapidă către un punct de minim local. Principalul dezavantaj al metodei Newton îl reprezintă instabilitatea provocată de anumiţi factori (e.g. iniţializarea într-o regiune îndepărtată de optim, condiţionarea matricei Hessiene). Cu toate acestea, în cazurile bine condiţionate când metoda converge, prezintă o convergenţă mult superioară metodelor de ordinul I. Ideea principală ce stă la baza metodei Newton o reprezintă aproximarea funcţiei obiectiv: pentru funcţia obiectiv f a problemei (3.1), la iteraţia k se construieşte aproximarea pătratică $\hat{f} \approx f$ (aproximarea Taylor de ordinul II) a funcţiei obiectiv în punctul curent x_k:

$$\hat{f}(x) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(x - x_k),$$

care se minimizează cu scopul obţinerii iteraţiei Newton. Dacă $\nabla^2 f(x_k)$ este pozitiv definită, atunci funcţia $\hat{f}(x)$ este convexă. Pe de altă parte, gradientul funcţiei $\hat{f}(x)$ este dat de:

$$\nabla \hat{f}(x) = \nabla^2 f(x_k)(x - x_k) + \nabla f(x_k),$$

iar minimul funcţiei $\hat{f}(x)$ va fi atins într-un punct $\bar{x}$ ce satisface $\nabla \hat{f}(\bar{x}) = 0$. Considerând următorul punct x_{k+1} al şirului ca fiind punctul ce anulează gradientul funcţiei $\hat{f}(x)$, i.e. $\nabla \hat{f}(x_{k+1}) = 0$, implicit vom obţine sistemul liniar de ecuaţii:

$$\nabla^2 f(x_k)(x_{k+1} - x_k) = -\nabla f(x_k), \tag{4.1}$$

de unde rezultă iteraţia metodei Newton standard:

$$x_{k+1} = x_k - \left(\nabla^2 f(x_k)\right)^{-1} \nabla f(x_k).$$

Varianta generală a metodei Newton este dată de iteraţia:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left(\nabla^2 f(x_k)\right)^{-1} \nabla f(x_k),$$

considerând selectarea pasului α_k prin aceleaşi moduri ca la metodele de ordinul I: line search (ideal), backtracking sau $\alpha_k = \alpha$ constant. Observăm că metoda Newton standard are dimensiunea pasului unitar constant, i.e. $\alpha_k = 1$.
Dacă funcţia f este pătratică strict convexă (i.e. $\nabla^2 f(x) \succ 0$ pentru orice x), atunci metoda Newton converge într-un singur pas către punctul de minim. În general, metoda Newton nu converge decât dacă iniţializarea se realizează în vecinătatea punctului de minim. Există două motivaţii pentru acest comportament: (i) dacă funcţia obiectiv f este puternic neliniară atunci $\hat{f}$ este o aproximare inexactă lui f, de aceea există posibilitatea ca $f(x_{k+1}) > f(x_k)$; (ii) nu avem garanţia că $\nabla^2 f(x_k) \succ 0$ pe parcursul iteraţiilor metodei. Mai exact, dacă $\nabla^2 f(x_k) \not\succeq 0$ sau $\det\left(\nabla^2 f(x_k)\right) = 0$, atunci este posibil ca $\hat{f}(x)$ să nu aibă punct de minim. Implementarea metodei Newton necesită abordarea a doi factori importanţi:

(i) este necesară implementarea unei reguli de alegere a dimensiunii pasului α_k, astfel încât să eliminăm posibilitatea de creştere a funcţiei obiectiv în punctele depărtate de optim, fapt datorat impreciziei aproximării pătratice. În cazul în care funcţia obiectiv nu este convexă, însă problema de minimizare admite o soluţie, atunci inversa Hessianei nu este pozitiv definită în mod cert decât în apropierea soluţiei;

(ii) dacă nu putem asigura ca Hessiana este pozitiv definită în fiecare punct al şirului $\{x_k\}_{k\geq 0}$, o abordare des întâlnită presupune înlocuirea Hessianei cu o matrice Hessiană modificată $G = \epsilon I_n + \nabla^2 f(x) \succ 0$, cu $\epsilon \geq 0$. Menţionăm că întotdeauna va exista un ϵ suficient de mare astfel încât $G \succ 0$. Reamintim că cel mai simplu algoritm pentru a verifica dacă o matrice dată este sau nu pozitiv definită este factorizarea Cholesky.

4.2 Probleme rezolvate de laborator

4.2.1 Metoda Newton

Exemplul 18. Să se implementeze metoda Newton cu cele trei variante de alegere a dimensiunii pasului (ideal, backtracking, pas unitar constant) pentru rezolvarea problemei:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x) \quad (= (x_1 - x_2^3)^2 + 3(x_1 - x_2)^4). \tag{4.2}$$

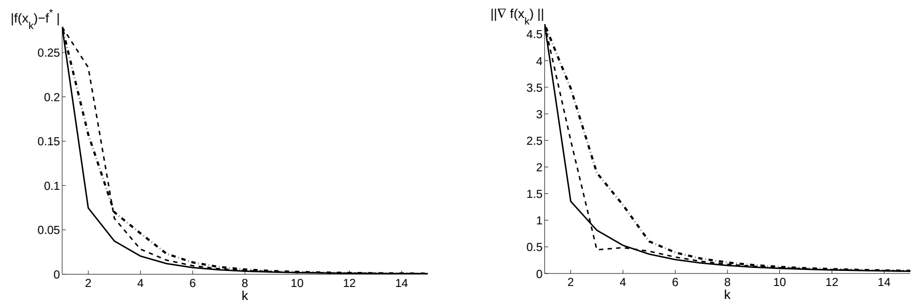

Figura 4.1: *Comparaţia convergenţei metodei Newton utilizând cele trei opţiuni pentru selectarea paşilor: ideal (linie continuă), backtracking (linie punctată întreruptă) şi pas constant unitar (linie întreruptă) pentru problema* (4.2).

Rezolvare. Utilizăm funcţii auxiliare ce returnează informaţii de ordinul I şi II:

```
[f,g]=f_obj(x)
H=hess_obj(x).
```

Funcţia `f_obj` returnează valoarea $f(x)$ şi $\nabla f(x)$ prin variabilele `f,g`, `hess_obj` returnează $\nabla^2 f(x)$ prin variabile `H`. Pentru selectarea pasului ideal, construim funcţia:

```
f=alpha_search(alpha,x,d)
```

ce returnează $f(x+\alpha d)$ în f. De asemenea, pentru metoda backtracking construim funcţia:

```
alpha=alpha_bactrack(x,d).
```

Condiţia de oprire va fi aceeaşi ca şi în cazul metodei gradient, anume $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$, unde $\epsilon > 0$ reprezintă acurateţea dorită. Secvenţa de cod ce implementează metoda Newton este prezentată în cele ce urmează:

```
function xmin=newton_method(x0,eps)
%initializam vectori/matrice pentru memorarea gradientilor,
%a punctelor x generate de algoritm, etc
puncte_gradient=[];
puncte_iteratie=[];
```

```
valori_functie=[];
norme_gradienti=[];
%vom utiliza un vector g pentru a stoca gradientul curent
%o matrice H pentru a stoca Hessiana curenta
%calculam directia corespunzatoare in d
x=x0;
[f,g]=f_obj(x);
while(norm(g)>eps)
  [f,g]=f_obj(x);
  H=hess_obj(x);
  d=H\-g;
  puncte_gradient=[puncte_gradient g];
  puncte_iteratie=[puncte_iteratie x];
  valori_functie=[valori_functie; f];
  norme_gradienti=[norme_gradienti; norm(g)];
  %Aici selectam alpha=1 constant,
  %alpha=fminbnd(...) pentru exact line search,
  %sau alpha=alpha_bactrack(...)
  %pentru metoda de backtracking
  alpha=fminbnd(@(alpha) alpha_search(alpha,x,d),0,1);
  x=x+alpha*d
end
xmin=x;

%Pentru afisarea grafica a rezultatelor,
%avem urmatoarele instructiuni
t=1:length(valori_functie);
figure(1)
hold on
plot(t,norme_gradienti(t),'k','LineWidth',2);
hold off
figure(2)
hold on
plot(t,valori_functie(t),'k','LineWidth',2);
hold off

%Pentru trasarea liniilor de contur si evolutia
%metodei gradient, avem urmatoarele instructiuni
[x1,x2]=meshgrid([1.2:0.01:2.8],[0.4:0.01:1.6]);
```

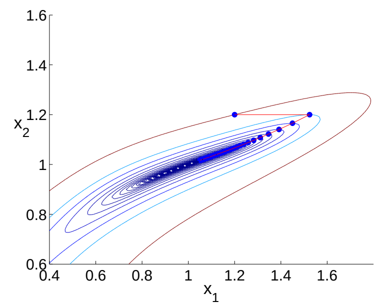

Figura 4.2: *Graficul punctelor obţinute de metoda Newton cu pas ideal şi liniile de contur aferente pentru problema* (4.2).

```
z=(x1-2).^4+(x1-2.*x2).^2;
figure(3)
hold on
contour(x1,x2,z,valori_functie)
plot3(puncte_iteratie(1,:),puncte_iteratie(2,:),...
valori_functie,'r')
scatter3(puncte_iteratie(1,:),puncte_iteratie(2,:),...
valori_functie,'filled')
hold off
```

Rezultatele comparative pentru metoda Newton utilizând cele trei opţiuni pentru selectarea pasului pot fi observate în Fig. 4.1. În Fig. 4.2 observăm punctele obţinute de metoda Newton şi curbele de nivel aferente.

4.2.2 Metode cvasi-Newton

Deşi metoda Newton prezintă convergenţă pătratică, în multe cazuri ea prezintă dezavantaje din punct de vedere al efortului de calcul datorită necesităţii calculului derivatelor de ordinul I şi a rezolvării sistemului de ecuaţii (4.1) la fiecare iteraţie. Pentru probleme de dimensiuni mari ce nu pot fi abordate cu metoda Newton au fost dezvoltate metode de tip *cvasi-Newton*. Această clasă de metode presupun înlocuirea matricei Hessiene cu una simetrică pentru care operaţia de inversare nu este costisitoare. Şirul de matrice rezultat permite evitarea calculului derivatelor de ordinul II şi simplifică rezolvarea sistemului de ecuaţii (4.1) necesar determinării direcţiei. Un algoritm de tip cvasi-Newton este definit de următoarea schemă:

Fie punctul iniţial $x_0 \in \mathrm{dom} f$ şi matricea iniţială $H_0 \succ 0$. Pentru $k \geq 1$, cât timp criteriul de oprire nu este satisfăcut, iterăm:

1. se calculează direcţia cvasi-Newton $d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k)$;
2. se determină pasul α_k (e.g. prin metoda de backtracking);
3. se calculează următoarea iteraţie: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$;
4. se calculează o nouă matrice H_{k+1}.

Metodele de tip cvasi-Newton diferă prin regula de actualizare a matricei H_k. Cea mai des utilizată variantă este metoda *Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno* (sau metoda BFGS pe scurt):

$$H_k = H_{k-1} + \frac{\delta_k \delta_k^T}{\delta_k^T \Delta_k} - \frac{H_{k-1} \Delta_k \Delta_k^T H_{k-1}}{\Delta_k^T H_{k-1} \Delta_k},$$

unde

$$\Delta_k = x_k - x_{k-1}\ , \delta_k = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}).$$

O altă versiune a metodei BFGS consideră actualizarea directă a inversei matricei H_k:

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

Structura algoritmului cvasi-Newton cu actualizare BFGS este definită de următoarea schemă:

Selectăm un punct iniţial $x_0 \in \mathbb{R}^n$, o toleranţă $\epsilon > 0$ şi o matrice $H_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrică şi pozitiv definită. Cât timp $\|\nabla f(x_k)\| > \epsilon$,

1. calculăm direcţia $d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k)$;
2. calculăm pasul $\alpha_k = \arg\min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k)$;
3. calculăm noua iteraţie $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ şi $\Delta_k = \alpha_k d_k$;
4. evaluăm $\nabla f(x_{k+1})$ şi calculăm $\delta_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$;
5. calculăm H_{k+1} prin formula BFGS; $k = k + 1$.

O observaţie importantă este diferenţa dintre rata de convergenţă locală a metodei Newton şi a metodelor de tip cvasi-Newton. Cu toate că metodele cvasi-Newton prezintă o complexitate per iteraţie mai mică, rata de convergenţă este (super)liniară în timp ce metoda Newton prezintă o rată de convergenţă pătratică locală.

4.3 Probleme rezolvate de seminar

4.3.1 Metoda Newton şi metoda BFGS

Problema 1. Fie problema de optimizare

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

unde $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ este pătratică, i.e $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + q^T x$. Să se arate că pentru f convexă metoda Newton standard converge într-un singur pas.

Rezolvare. Din condiţiile de optimalitate de ordinul I, i.e. $\nabla f(x) = Qx + q = 0$ va rezulta că $x^* = -Q^{-1}q$. Reţinem că direcţia metodei Newton este $d = -(\nabla f(x))^{-1}\nabla f(x)$, care in cazul pătratic va fi:

$$d = -Q^{-1}(Qx + q) = -x - Q^{-1}q.$$

Astfel, pentru un punct iniţial x_0 şi un pas $\alpha_0 = 1$, vom avea:

$$x_1 = x_0 + \alpha_0 d_0 = x_0 - x_0 - Q^{-1}q = -Q^{-1}q.$$

Din moment ce f este convexă, va rezulta automat că $\nabla^2 f(x_0) = Q \succeq 0$, iar drept urmare $x_1 = x^*$.

Problema 2. Fie funcţia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ convexă şi diferenţiabilă de două ori. Să se determine expresia iteraţiei metodei Newton standard prin intermediul aproximării Taylor de ordinul II. Este posibilă şi o altă modalitate de a obţine această iteraţie?

Rezolvare. Deoarece funcţia f este diferenţiabilă de două ori, în orice punct al domeniului acesteia $\bar{x} \in \mathrm{dom} f$, se poate aproxima cu o formă pătratică:

$$f(x) \approx f(\bar{x}) + \nabla f(\bar{x})^T(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}(x - \bar{x})^T \nabla^2 f(\bar{x})(x - \bar{x}).$$

Precizăm că partea dreaptă a expresiei anterioare se numeşte *aproximarea Taylor de ordinul II în punctul* $\bar{x}$ a funcţiei f.
Fie punctul curent x_k al metodei Newton, următoarea iteraţie x_{k+1} se determină din minimizarea neconstrânsă a aproximării de ordinul II în punctul x_k a funcţiei obiectiv:

$$x_{k+1} = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^n} f(x_k) + \nabla f(x_k)^T(y - x_k) + \frac{1}{2}(y - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(y - x_k).$$

Deoarece funcţia f este convexă, matricea $\nabla^2 f(x_k)$ este pozitiv semi-definită, deci aproximarea pătratică este convexă. Determinăm punctul de minim al acestei aproximări din condiţiile de optimalitate de ordinul I:

$$\nabla^2 f(x_k)(y^* - x_k) + \nabla f(x_k) = 0,$$

de unde rezultă iteraţia:

$$x_{k+1} = y^* = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k).$$

O modalitate alternativă de a deduce iteraţia Newton este descrisă de liniarizarea expresiei gradientului funcţiei obiectiv în punctul curent x_k:

$$\nabla f(x) \approx \nabla f(\bar{x}) + \nabla^2 f(\bar{x})(y - \bar{x}),$$

unde considerăm $\nabla f(\bar{x})$ şi $\nabla^2 f(\bar{x})$ cunoscute. Pentru a obţine iteraţia Newton, la momentul $k + 1$, egalăm cu 0 aproximarea liniară a gradientului, în punctul x_k:

$$\nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)(y^* - x_k) = 0,$$

de unde rezultă:

$$x_{k+1} = y^* = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k).$$

Menţionăm în plus că iteraţia metodei Newton generale

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k)$$

se obţine din minimizarea unei aproximări Taylor pătratice de forma:

$$x_{k+1} = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^n} f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (y - x_k) + \frac{1}{2\alpha_k}(y - x_k)^T \nabla^2 f(x_k)(y - x_k).$$

De asemenea, iteraţia metodei gradient $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$ se poate obţine dintr-o aproximare pătratică de forma:

$$x_{k+1} = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^n} f(x_k) + \nabla f(x_k)^T (y - x_k) + \frac{1}{2\alpha_k}\|y - x_k\|^2.$$

Problema 3. Fie problema de optimizare neconstrânsă:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x) \quad \left(= \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{5}{2}x_2^2 + 2x_1x_2 + 2x_1 + 4x_2\right).$$

(i) Să se scrie problema ca o problemă QP (*Quadratic Programming*). Să se arate că problema este convexă.
(ii) Să se determine punctul de minim x^* al problemei.
(iii) Pornind din punctul $x^0 = [1 \ \ -1]^T$, să se determine pasul optim α_0 corespunzător metodei gradient şi să se implementeze prima iteraţie a acestei metode cu pasul obţinut.
(iv) Să se implementeze prima iteraţie a metodei Newton standard pentru problema precedentă. Să se compare punctul x_1 al metodei gradient cu cel al metodei Newton. Ce se observă?

Rezolvare. (i) Prin rescrierea sub formă matriceală a funcţiei obiectiv ajungem la forma QP:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 2 & 4 \end{bmatrix} x.$$

Pentru a determina convexitatea funcţiei, verficăm dacă matricea Hessiană:

$$\nabla^2 f(x) = Q = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix}$$

este pozitiv semidefinită. Observăm că minorii principali sunt strict pozitivi, rezultând că Hessiana este pozitiv definită.

(ii) Deoarece funcţia obiectiv este strict convexă, punctul de minim neconstrâns este dat de condiţiile de optimalitate de ordinul I:

$$\nabla f(x^*) = Qx^* + q = 0,$$

unde $q = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}$ şi de unde rezultă soluţia unică $x^* = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}$.

(iii) Reamintim procedura de selectare a lungimii ideale a pasului:

$$\alpha_0 = \arg\min_{\alpha\geq 0} \phi(\alpha) = \arg\min_{\alpha\geq 0} f(x_0 - \alpha\nabla f(x_0)). \tag{4.3}$$

Obţinând direcţia de gradient $d_0 = -\nabla f(x_0) = Qx_0 + q = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}$, evaluăm funcţia obiectiv:

$$\begin{aligned}\phi(\alpha) = f(x_0 - \alpha \nabla f(x_0)) &= \frac{1}{2}\left[(1-\alpha)^2 + 5(1+\alpha)^2\right] - 2(1-\alpha^2) - 6\alpha - 2 \\ &= 5\alpha^2 - 2\alpha - 1.\end{aligned}$$

Observăm că punctul de minim global neconstrâns al funcţiei $\phi(\alpha)$ este $\alpha^* = \frac{1}{5}$. Deoarece problema (4.3) este constrânsă, iar punctul de minim neconstrâns α^* se află în mulţimea fezabilă $\{\alpha \in \mathbb{R} : \alpha \geq 0\}$, concluzionăm că lungimea ideală a pasului este $\alpha_0 = \frac{1}{5}$. Prima iteraţie a metodei gradient cu pas ideal este dată de:

$$x_1^G = x_0 - \alpha_0 \nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} \frac{4}{5} \\ -\frac{6}{5} \end{bmatrix}.$$

(iv) Metoda Newton standard presupune următoarea iteraţie:

$$x_{k+1} = x_k - \left[\nabla^2 f(x_k)\right]^{-1} \nabla f(x_k).$$

În cazul nostru, funcţia obiectiv este pătratică (implicit de două ori diferenţiabilă) cu Hessiana:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{bmatrix}.$$

Calculăm inversa matricei Hessiene:

$$\left[\nabla^2 f(x)\right]^{-1} = \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix},$$

iar primul pas al metodei Newton standard este dat de:

$$x_1^N = x_0 - \left[\nabla^2 f(x_0)\right]^{-1} \nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix} = x^*.$$

În concluzie, metoda Newton converge pentru această problemă într-un singur pas către punctul de minim.

Problema 4. Fie funcţia $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, definită de:

$$f(x_1, x_2) = \frac{x_1^4}{4} + \frac{x_2^4}{4} - \frac{x_1^3}{3} - \frac{x_2^3}{3}.$$

(i) Să se determine un punct de minim local al problemei:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x)$$

(ii) Să se calculeze prima iteraţie a metodei Newton alegând punctul iniţial $x^0 = [-1\ 1]^T$ şi considerând cazurile în care pasul $\alpha_0 = 1$ şi α_0 este selectat ideal.

Rezolvare. (i) Calculăm mai întâi expresia gradientului şi Hessianei:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} x_1^3 - x_1^2 \\ x_2^3 - x_2^2 \end{bmatrix}, \qquad \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 3x_1^2 - 2x_1 & 0 \\ 0 & 3x_2^2 - 2x_2 \end{bmatrix}.$$

Din condiţia $\nabla f(x^*) = 0$ deducem că componentele lui x^* satisfac condiţia $x_1^*, x_2^* \in \{0, 1\}$, iar pentru $x^* = [1\ 1]^T$ avem:

$$\nabla^2 f(1,1) = I_2 \succ 0,$$

deci $x^* = [1\ 1]^T$ este punct de minim strict local.
(ii) Pentru punctul iniţial $x^0 = [-1\ 1]^T$ avem:

$$\nabla f(x^0) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad \nabla^2 f(x^0) = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \left[\nabla^2 f(x^0)\right]^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{5} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

de unde rezultă direcţia Newton:

$$d_0 = -[\nabla^2 f(x^0)]^{-1} \nabla f(x^0) = \begin{bmatrix} d_1^0 \\ d_2^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{5} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Acum, pentru determinarea pasului ideal, trebuie să calculăm $\phi(\alpha) = f(x_0 + \alpha d_0)$ pentru funcţia noastră obiectiv:

$$\begin{aligned}\phi(\alpha) &= \frac{1}{4}(x_1 + \alpha d_1^0)^4 + \frac{1}{4}(x_2 + \alpha d_2^0)^4 - \frac{1}{3}(x_1 + \alpha d_1^0)^3 - \frac{1}{3}(x_2 + \alpha d_2^0)^3. \\ &= \frac{1}{4}(x_1 + \frac{2\alpha}{5})^4 - \frac{1}{3}(x_1 + \frac{2\alpha}{5})^3 + \frac{x_2^4}{4} - \frac{x_2^3}{3}.\end{aligned}$$

Rezolvam̆ ecuaţia $\phi'(\alpha) = 0$, de unde obţinem $\alpha^* = 5$. Astfel, pentru pasul $\alpha_0 = 1$, respectiv $\alpha_0 = 5$ iteraţiile sunt date de:

$$x_1 = \begin{bmatrix} \frac{3}{5} \\ 1 \end{bmatrix}, \ x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = x^*.$$

Evaluând funcţia obiectiv în cele două puncte $f(3/5, 1) = 0.0211$, $f(1, 1) = -0.1667$, constatăm o descreştere mai bună cu dimensiunea ideală a pasului.

Problema 5. Dacă efectuăm o actualizare de rang 1 asupra unei matrice pătrate şi nesingulare A şi notăm rezultatul cu $\bar{A}$, i.e.:

$$\bar{A} = A + uv^T,$$

unde $a, b \in \mathbb{R}^n$, atunci formula Sherman-Morrison-Woodbury are loc:

$$\bar{A}^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u}. \tag{4.4}$$

Rezolvare. Pentru a verifica această formulă, conform definiţiei matricei inverse, avem egalitatea $\bar{A}^{-1}\bar{A} = I_n$. Astfel, simplu înmulţim pe $\bar{A}$ cu $\bar{A}^{-1}$:

$$\begin{aligned}
\bar{A}^{-1}\bar{A} &= \left(A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u}\right)(A + uv^T) \\
&= I_n + A^{-1}uv^T - \frac{A^{-1}uv^T + A^{-1}u(v^T A^{-1}u)v^T}{1 + v^T A^{-1}u} \\
&= I_n + A^{-1}uv^T - \frac{A^{-1}uv^T + (v^T A^{-1}u)A^{-1}uv^T}{1 + v^T A^{-1}u} \\
&= I_n + A^{-1}uv^T - \frac{1 + v^T A^{-1}u}{1 + v^T A^{-1}u}A^{-1}uv^T = I_n.
\end{aligned}$$

Problema 6. Fie funcţia $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, definită de $f(x) = (x-1)^2/(x^2+1)$. Să se implementeze metoda Newton pornind din punctele iniţiale $x_0 = \{-2, 0, -1\}$. Ce se observă?

Rezolvare. Calculăm mai întâi gradientul funcţiei şi Hessiana:

$$\nabla f(x) = \frac{2(x^2-1)}{(x^2+1)^2}, \ \nabla^2 f(x) = \frac{4x(3-x^2)}{(x^2+1)^3}.$$

Din condiţiile de optimalitate va rezulta desigur că $x^* = 1$ este punct de minim local strict. Utilizând expresiile obţinute ale gradientului şi Hessianei, deducem expresia direcţiei Newton:

$$d(x) = -[\nabla^2(f(x)]^{-1}\nabla f(x) = -\frac{x^4 - 1}{2x(3-x^2)}.$$

Astfel, pentru punctele iniţiale avem:

$$d(-2) = \frac{-15}{4}, \ d(-1) = 0,$$

iar în $x_0 = 0$ avem $\nabla^2 f(0) = 0$ şi direcţia Newton în acest caz nu există. Observăm că pentru $x_0 = -1$ metoda Newton va rămâne în acelaşi punct. Pe de altă parte, pentru $x_0 = 0$ Hessiana nu este inversabilă, iar metoda Newton standard nu poate fi aplicată. Pentru $x_0 = -2$ avem $x_1 = -2-15/4 = -23/4$, iar din expresia direcţiei deducem că metoda diverge. Observăm că pentru un punct iniţial suficient de aproape de punctul de optim, e.g. $x_0 = 1.3$, metoda Newton converge.

Problema 7. Fie funcţia $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, definită de $f(x) = x_1^4 + x_1x_2 + (1+x_2)^2$. Să se descrie performanţele metodei Newton aplicată problemei:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} f(x),$$

pornind din punctul iniţial $x_0 = [0\ \ 0]^T$.

Rezolvare. Calculăm expresiile gradientului şi Hessianei:

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} 4x_1^3 + x_2 \\ x_1 + 2(x_2+1) \end{bmatrix}, \quad \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} 12x_1^2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

şi evaluând aceste expresii în x_0 avem:

$$\nabla f(x^0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}, \ \nabla^2 f(x^0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \ (\nabla^2 f(x^0))^{-1} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Astfel, direcţia Newton pentru punctul x_0 va fi:

$$d_0 = -(\nabla^2 f(x_0))^{-1}\nabla f(x_0) = \begin{bmatrix} -2 \\ 0 \end{bmatrix},$$

iar $\nabla f(x_0)^T d_0 = 0$. Observăm că aceeaşi egalitate este valabilă de asemenea pentru $-d_0$. Astfel, d_0 nu este direcţie de descreştere. În plus, observăm că $f(x_0) = 1$, iar pentru $x_1 = x_0 + d_0 = [-2\ 0]^T$, vom avea $f(x_1) = 17$, iar pentru $x_1 = x_0 - d_0$ vom avea tot $f(x_1) = 17$.

Problema 8. O problemă fundamentală din domeniul prelucrării semnalelor o reprezintă recuperarea unui semnal x dintr-unul corupt y (fiind semnalul adevărat x combinat cu zgomot). De cele mai multe ori, problema este abordată prin aproximarea cât mai fidelă a semnalului adevărat prin intermediul rezolvării următoarei probleme de optimizare:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|x-y\|_2 + \mu\sum_{i=1}^{n-1}|x_{i+1} - x_i|,$$

Observăm că deşi primul termen ce denotă distanţa Euclidiană dintre semnalul adevărat x şi cel corupt y este suficient pentru a găsi o aproximare relativ fidelă, se adaugă un termen de regularizare descris de suma diferenţelor dintre elementele consecutive ale semnalului x. Acest termen de regularizare are scopul de a asigura găsirea unei aproximări cât mai netede, fără variaţii bruşte ale componentelor. Observăm că funcţia obiectiv a problemei anterioare este nediferenţiabilă.

(i) Să se determine o aproximare a problemei de optimizare precedente, cu funcţia obiectiv continuu diferentiabilă;

(ii) Să se calculeze forma explicită a gradientului şi Hessianei corespunzătoare noii funcţii obiectiv de la punctul a), şi să se aplice un pas al metodei Newton.

Rezolvare. (i) O aproximare netedă (*smooth*) a problemei din enunţ este dată de:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \; f(x) \quad \left(= \; \|x-y\|_2^2 + \mu \sum_{i=1}^{n-1}\left(\sqrt{\epsilon^2 + (x_{i+1}-x_i)^2} - \epsilon\right)\right),$$

unde $\epsilon > 0$ este suficient de mic.

(ii) Determinăm forma explicită a primului pas din metoda Newton. Reamintim direcţia Newton: $d_N = -[\nabla^2 f(x)]^{-1}\nabla f(x)$. Notând $\phi_\epsilon(x) = \mu \sum\limits_{i=1}^{n-1}\left(\sqrt{\epsilon^2 + (x_{i+1}-x_i)^2} - \epsilon\right)$, se observă că gradientul funcţiei obiectiv a problemei de la punctul a) este:

$$\nabla f(x) = 2(x-y) + \mu\nabla\phi_\epsilon(x).$$

Mai departe, Hessiana aceleiaşi funcţii este dată de: $\nabla^2 f(x) = 2I_n + \mu\nabla^2\phi_\epsilon(x)$. În concluzie, dificultatea se reduce la determinarea formei explicite a gradientului şi matricei Hessiane corespunzătoare funcţiei ϕ_ϵ. Pentru o expunere simplificată, notăm $g(u) = \mu \sum\limits_{i=1}^{n-1}\left(\sqrt{\epsilon^2 + u_i^2} - \epsilon\right)$, şi observăm că $\phi_\epsilon(x) = g(Ax)$, unde $A \in \mathbb{R}^{n-1\times n}$ dată de:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Precizăm că sunt suficiente expresiile derivatelor funcţiei g pentru a le determina pe cele ale funcţiei ϕ_ϵ. Astfel, determinăm forma explicită a componentelor acestora:

$$\nabla_i g(u) = \frac{u_i}{\sqrt{\epsilon^2 + u_i^2}} \qquad \nabla_{ii}^2 g(u) = \frac{\epsilon^2}{\sqrt{\epsilon^2 + u_i^2}}.$$

Deoarece funcţia g este separabilă, Hessiana acesteia este matrice diagonală. În final avem:

$$\nabla f(x) = 2(x-y) + \mu A^T \nabla g(Ax) \qquad \nabla^2 f(x) = 2I_n + \mu A^T \nabla^2 g(Ax) A$$

şi observăm că matricea $\nabla^2 f(x)$ este superior bidiagonală. Direcţia Newton este dată de soluţia sistemului superior bidiagonal:

$$\nabla^2 f(x) d_N = -\nabla f(x),$$

ce se rezolvă în $\mathcal{O}(n)$ operaţii.

4.4 Probleme propuse

Problema 1. Pentru următoarele două probleme, să se determine punctele de optim şi să se implementeze primii trei paşi ai metodei Newton standard, i.e. cu pas constant $\alpha = 1$:

(i) $\min_{x\in\mathbb{R}} \ln(e^x + e^{-x})$, pornind din $x_0 = 1$ şi $x_0 = 1.1$

(ii) $\min_{x\in\mathbb{R}} -\ln x + x$, pornind din $x_0 = 3$

Ce se observă după primii trei paşi?

Problema 2. Fie următoarea problemă de optimizare:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} x_1^2 + 100x_2^2$$

Să se implementeze metoda BFGS cu pas optim la fiecare iteraţie, pornind din punctul iniţial $x^0 = [1\ 1]^T$ şi matricea iniţială $H_0 = I_2$. În câţi paşi converge metoda la punctul de optim?

Problema 3. Să se implementeze primii doi paşi ai metodei DFP (Davidon-Fletcher-Powell) pentru următoarea problemă:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^2} x_1^2 + 3x_2^2 + e^{1+x_1^2+x_2^2}$$

pornind din punctul iniţial $x = [1\ 1]^T$ şi matricea iniţială $H_0 = I_2$.

Problema 4. Pentru problema din exerciţiul 2 din cadrul problemelor propuse, să se implementeze primele trei iteraţii ale algoritmului Fletcher-Reeves de gradienţi conjugaţi pornind din acelaşi punct iniţial şi să se compare iteraţiile acesteia cu cele ale metodei BFGS.

Problema 5. Fie o matrice $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrică şi doi vectori $s, y \in \mathbb{R}^n$. Fie $B_0 = B$ şi şirul de matrice:

$$\hat{B}_k = B_k + \frac{(y - B_k s)s^T}{s^T s}, \qquad B_{k+1} = \frac{\hat{B}_k + \hat{B}_k^T}{2},$$

pentru orice $k > 0$. Arătaţi că şirul B_k converge la o matrice B_+ definită astfel:

$$B_+ = B + \frac{(y - Bs)s^T + s(y - Bs)^T}{s^T s} - \frac{(y - Bs)^T s}{(s^T s)^2} s s^T.$$

Problema 6. Fie funcţia f convexă că Hessiana $\nabla^2 f(x)$ bloc diagonală. Cum putem exploata această structură în calcularea direcţiei Newton? Ce semnificaţie are pentru f?

Problema 7. Pentru următoarele funcţii obiectiv, să se determine expresia lungimii unui pas selectat ideal $\alpha^* = \min_{\alpha\geq 0} f(x + \alpha d)$:

(i) $f(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log(b - a_i^T x)$. (ii) $f(x) = \log\left(\sum_{i=1}^{m} e^{(a_i^T x + b_i)}\right)$.

Problema 8. Descrieţi o metodă eficientă de calcul al direcţiei Newton corespunzătoare funcţiei:

$$f(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log\left(-x^T Q_i x - b_i^T x - c_i\right),$$

unde $m \ll n$, iar matricele $Q_i \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $Q_i \succ 0$ au dimensiuni mari şi structură rară.

Problema 9. Fie vectorul $y \in \mathbb{R}^n$ vector cunoscut, funcţia $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ este definită de:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} g(x_i - y_i) + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)^2$$

unde $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ este o funcţie convexă şi de două ori diferenţiabilă, $\lambda > 0$. Să se determine expresia Hessianei $\nabla^2 f(x)$. Care este numărul de operaţii necesar pentru calcularea direcţiei Newton în orice punct x?

Problema 10. Considerăm următoarea problemă de optimizare neconstrânsă:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad \left(= \sum_{i=1}^{p} g_i(A_i x - b_i)\right)$$

unde $A_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n}$, $b_i \in \mathbb{R}^{m_i}, m_i \ll n$, iar $g_i \colon \mathbb{R}^{m_i} \to \mathbb{R}$ funcţii convexe şi de două ori diferenţiabile. Ştiind că A_i au structură rară, calculaţi expresia Hessianei şi a gradientului lui f şi discutaţi o modalitate eficientă de implementare a metodei Newton pentru această problemă.

Problema 11. Fie funcţia $f(x) = 20 + x_1^2 - 10\cos(2\pi x_1) + x_2^2 - 10\cos(2\pi x_2)$. Să se implementeze metoda cvasi-Newton (BFGS) cu alegerea ideală a dimensiunii pasului pentru rezolvarea problemei:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} f(x). \tag{4.5}$$

Să se rezolve problema (4.5) prin apelarea funcţiei `fminunc` şi sa se compare rezultatele obţinute.