Anul II, Calculatoare şi Tehnologia Informaţiei
Disciplina: Modelare şi simulare

Partea a II–a – Introducere în Teoria Optimizării

Noţiuni teoretice

1. Concepte fundamentale

$$\begin{array}{rl} \text{minimizaţi} & f(\mathbf{x}) \\ \text{supusă la} & \mathbf{x} \in \Omega \end{array}$$

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ se numeşte *funcţie obiectiv* (*cost*)
$\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$
$x_1, x_2, ..., x_n$ se numesc *variabile de decizie*
Ω se numeşte *mulţimea constrângerilor* sau *mulţimea fezabilă*

Definiţia 1. Fie $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, o mulţime deschisă, şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, o funcţie.

- Un punct, $\mathbf{x}^* \in \Omega$, se numeşte *punct de minim local* pentru f dacă există $\varepsilon > 0$ astfel încât $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$, pentru orice $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \{\mathbf{x}^*\}$ cu $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| < \varepsilon$.
- Un punct, $\mathbf{x}^* \in \Omega$, se numeşte *punct de minim global* pentru f dacă $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$, pentru orice $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \{\mathbf{x}^*\}$.

Dacă $\mathbf{x}^*$ este punct de minim global pentru f, scriem

$$f(\mathbf{x}^*) = \min_{\mathbf{x} \in \Omega} f(\mathbf{x}) \quad \text{şi} \quad \mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x} \in \Omega} f(\mathbf{x}).$$

Derivata direcţională a funcţiei f în direcţia lui $\mathbf{d}$ este

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{x}) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) - f(\mathbf{x})}{\alpha}.$$

Dacă $\|\mathbf{d}\| = 1$, atunci $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{x})$ reprezintă *rata de creştere* a funcţiei f în punctul $\mathbf{x}$ după direcţia lui $\mathbf{d}$.

Atunci

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{d}}(\mathbf{x}) = \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha} f(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})\right|_{\alpha = 0} = \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{d} = \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{d} \rangle.$$

Definiţia 2. Fie $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^1, şi $\mathbf{x} \in \Omega$. O direcţie, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, se numeşte *direcţie de descreştere* pentru f dacă

$$\nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{d} < 0.$$

Teorema 3. (Condiţie necesară de ordinul I) Fie $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^1. Dacă $\mathbf{x}^*$ este un punct de minim local pentru f, atunci

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0.$$

Teorema 4. (Condiţie necesară de ordinul al II-lea) Fie $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^2, şi $\mathbf{x}^*$, un punct de minim local pentru f. Atunci matricea hessiană a funcţiei f în punctul $\mathbf{x}^*$, notată cu $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$, este pozitiv semidefinită.

Teorema 5. **(Condiţie suficientă de ordinul al II-lea)** Fie $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^2, şi $\mathbf{x}^* \in \Omega$, un punct staţionar al acesteia (i.e., $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$), astfel încât matricea hessiană $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ este pozitiv definită. Atunci $\mathbf{x}^*$ este punct de minim local strict pentru f.

Definiţia 6. Fie $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, o mulţime convexă, şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, o funcţie. Spunem că funcţia f este *convexă* pe Ω dacă are loc inegalitatea

$$f(\theta \mathbf{x}_1 + (1-\theta)\mathbf{x}_2) \leq \theta f(\mathbf{x}_1) + (1-\theta) f(\mathbf{x}_2),$$

pentru orice $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Omega$ şi $\theta \in [0,1]$.

Exemple. a) Fie $\|\cdot\|$, o normă oarecare pe $\mathbb{R}^n$. Funcţia $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ este convexă pe $\mathbb{R}^n$.

b) Funcţia $f(\mathbf{x}) = \max(x_1, x_2, ..., x_n)$ este convexă pe $\mathbb{R}^n$.

c) Funcţia $f(X) = -\ln(\det X)$ este convexă pe spaţiul matricelor pozitiv definite.

Teorema 7. Fie $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, o mulţime deschisă şi convexă, şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^1. Atunci f este convexă dacă şi numai dacă

$$f(\mathbf{x}_2) \geq f(\mathbf{x}_1) + \nabla f(\mathbf{x}_1)^T (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1),$$

pentru orice $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Omega$.

Teorema 8. Fie $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, o mulţime deschisă şi convexă, şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, o funcţie de clasă C^2. Atunci f este convexă dacă şi numai dacă matricea hessiană $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ este pozitiv semidefinită, pentru orice $\mathbf{x} \in \Omega$.

Exemple. a) Funcţia $f(x) = -\log x$ este convexă pe $\mathbb{R}_+$.

b) Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică. Funcţia $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} + \mathbf{a}^T \mathbf{x} + \mathbf{b}$ este convexă pe $\mathbb{R}^n$ dacă şi numai dacă matricea $\nabla^2 f = Q$ este pozitiv semidefinită.

Teorema 9. **(Condiţii suficiente de ordinul I)** Fie $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, o mulţime deschisă şi convexă, şi $f : \Omega \to \mathbb{R}$, o funcţie convexă, de clasă C^1. Dacă $\mathbf{x}^* \in \Omega$ este punct staţionar al lui f (i.e., $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$), atunci $\mathbf{x}^*$ este punct de minim global al lui f.

2. Convergenţa metodelor de descreştere

2.1. Noţiuni generale

O metodă numerică este dezvoltată în scopul rezolvării diferitelor probleme ce împărtăşesc caracteristici similare (de exemplu, continuitate, convexitate etc.).

Datele cunoscute din structura problemei se regăsesc sub numele de *model* (adică formularea problemei, funcţiile ce descriu problema etc.).

Pentru rezolvarea problemei, o metodă numerică va trebui să colecteze informaţia specifică, iar procesul de colectare a datelor se realizează cu ajutorul unui *oracol* (i.e., unitate de calcul ce returnează date sub forma uno răspunsuri la „întrebări" succesive din partea metodei). În concluzie, metoda numerică rezolvă problema prin colectarea datelor şi manipularea „răspunsurilor" oracolului.

Tipuri de oracole:

- oracole de ordinul zero, $\mathcal{O}_0$, ce furnizează informaţie bazată doar pe evaluarea funcţiei obiectiv, i.e., $f(\mathbf{x})$;

- oracole de ordinul întâi, $\mathcal{O}_1$, ce furnizează informaţie bazată doar pe evaluarea funcţiei obiectiv şi a gradientului acesteia, i.e., $f(\mathbf{x})$ şi, respectiv, $\nabla f(\mathbf{x})$;
- oracole de ordinul al doilea, $\mathcal{O}_2$, ce furnizează informaţie bazată doar pe evaluarea funcţiei obiectiv, a gradientului şi a hessianei acesteia, i.e., $f(\mathbf{x})$, $\nabla f(\mathbf{x})$ şi, respectiv, $\nabla^2 f(\mathbf{x})$.

Criterii de oprire:

- $\|\nabla f(\mathbf{x})\| < \varepsilon$;
- $|f(\mathbf{x}) - f^*| < \varepsilon$;
- $\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\right\| < \varepsilon$.

Metodă generică de optimizare numerică:

1. se începe cu un punct iniţial dat, $\mathbf{x}^{(0)}$, acurateţea $\varepsilon > 0$ şi contorul $k = 0$;
2. la pasul k notăm cu $\mathcal{I}_k$ mulţimea ce conţine toată informaţia acumulată de la oracol până la iteraţia k:
   (a) se apelează oracolul $\mathcal{O}$ în punctul $\mathbf{x}^{(k)}$;
   (b) se actualizează informaţia $\mathcal{I}_{k+1} = \mathcal{I}_k \cup \mathcal{O}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$;
   (c) se aplică regulile metodei numerice folosind ultimele informaţii $\mathcal{I}_{k+1}$ pentru calculul următorului punct, $\mathbf{x}^{(k+1)}$;
3. se verifică criteriul de oprire ales; dacă acesta nu este satisfăcut, se repetă pasul 2.

Complexitatea unei metode numerice poate fi exprimată în următoarele forme:

- complexitatea *analitică*, dată de numărul total de apeluri ale oracolului;
- complexitatea *aritmetică*, dată de numărul total de operaţii aritmetice.

Definiţia 10. Fie $\left\{\mathbf{x}^{(k)}\right\}_{k\geq 0}$, un şir convergent la $\mathbf{x}^*$, i.e., $\lim\limits_{k\to\infty} \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\| = 0$. Spunem că *ordinul de convergenţă* a şirului $\left\{\mathbf{x}^{(k)}\right\}_{k\geq 0}$ este $p \in \mathbb{R}$ dacă

$$0 < \limsup_{k\to\infty} \frac{\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\|}{\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|^p} < \infty.$$

- **Convergenţă liniară**: există $\beta \in (0,1)$ astfel încât
$$\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\| \leq \beta \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|, \quad \text{pentru orice } k \geq 0.$$
- **Convergenţă superliniară**: există un şir, $(\beta_k)_{k\geq 0}$, cu $\beta_k \to 0$, astfel încât
$$\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\| \leq \beta_k \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|, \quad \text{pentru orice } k \geq 0.$$
- **Convergenţă subliniară**:
$$\lim_{k\to\infty} \frac{\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\|}{\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|} = 1.$$
- **Convergenţă pătratică**: există $\beta \in (0,\infty)$ astfel încât
$$\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\| \leq \beta \left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|^2, \quad \text{pentru orice } k \geq 0.$$

Exemple. a) Şirul $\left(\frac{1}{k}\right)_{k\geq 1}$ are o convergenţă subliniară.

b) Şirul $\left(\frac{1}{k^\alpha}\right)_{k\geq 1}$, cu $\alpha > 0$, fixat, are o convergenţă subliniară.

c) Şirul $\left(\frac{1}{2^k}\right)_{k\geq 0}$ are o convergenţă liniară.

d) Şirul $\left(10^{-2^k}\right)_{k\geq 0}$ are o convergenţă pătratică.

e) Şirul $\left(\frac{1}{k^k}\right)_{k\geq 1}$ are o convergenţă superliniară.

2.2. Metode de descreştere

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)},$$

unde:

- $\mathbf{d}^{(k)}$ este o *direcţie de descreştere* pentru f în $\mathbf{x}^{(k)}$;
- $\alpha_k \in (0, 1]$ este *lungimea pasului.*

Scopuri:

- $f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) < f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$;
- $\lim\limits_{k\to\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x}^*$.

2.3. Metode de alegere a lungimii pasului

Metoda ideală

$$\alpha_k = \arg\min_{0<\alpha\leq 1} f\left(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)}\right)$$

Condiţiile Wolfe

(W1): $f\left(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}\right) \leq f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + c_1 \alpha_k \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)}$, cu $c_1 \in (0, 1)$;

(W2): $\nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)} \geq c_2 \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)}$, cu $0 < c_1 < c_2 < 1$.

Algoritmul backtracking:

1. se aleg $\alpha > 0$ (i.e., $\alpha = 1$), $\rho, c_1 \in (0, 1)$;
2. cât timp
$$f\left(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha \mathbf{d}^{(k)}\right) > f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + c_1 \alpha \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)},$$
se actualizează $\alpha \leftarrow \rho\alpha$;
3. ieşirea: $\alpha_k = \alpha$.

2.4. Convergenţa metodelor de descreştere

Definiţia 11. Fie $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie diferenţiabilă. Spunem că f are *gradient $L-$Lipschitz continuu* dacă există $L > 0$ astfel încât

$$\left\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\right\| \leq L \left\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\right\|,$$

pentru orice $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$.

Teorema 12. (Teorema de convergenţă a metodelor de descreştere) Considerăm problema de optimizare fără constrângeri

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

unde $f \in C^1$ este mărginită inferior şi are gradient $L-$Lipschitz continuu. Fie metoda iterativă $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}$, unde, pentru orice $k \geq 0$, $\mathbf{d}^{(k)}$

este o direcţie de descreştere şi pasul α_k este ales astfel încât condiţiile Wolfe sunt satisfăcute. Atunci

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \left\| \nabla f \left(\mathbf{x}^{(k)} \right) \right\|^2 < \infty,$$

unde θ_k este unghiul făcut de direcţia $\mathbf{d}^{(k)}$ cu gradientul $\nabla f \left(\mathbf{x}^{(k)} \right)$.

3. Metoda gradientului (a celei mai abrupte descreşteri)

Fie $\mathbf{x}^{(0)}$, un punct de pornire.
Considerăm punctul $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha \nabla f \left(\mathbf{x}^{(0)} \right)$.
Putem scrie

$$f(\mathbf{x}) = f\left(\mathbf{x}^{(0)} - \alpha \nabla f \left(\mathbf{x}^{(0)} \right) \right) = f\left(\mathbf{x}^{(0)} \right) - \alpha \left\| \nabla f \left(\mathbf{x}^{(0)} \right) \right\|^2 + o(\alpha).$$

Dacă $\nabla f \left(\mathbf{x}^{(0)} \right) \neq \mathbf{0}$, atunci, pentru $\alpha > 0$, suficient de mic, avem

$$f(\mathbf{x}) < f\left(\mathbf{x}^{(0)} \right).$$

Algoritmul celei mai abrupte descreşteri
(The Method of Steepest Descent)

Fie $\mathbf{x}^{(0)}$, un punct de pornire.
Atunci

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \nabla f \left(\mathbf{x}^{(k)} \right), \quad k = 0, 1, ...,$$

unde

$$\alpha_k = \arg \min_{\alpha \geq 0} f\left(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha \nabla f \left(\mathbf{x}^{(k)} \right) \right).$$

Teorema 13. Vectorul $\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$ este ortogonal pe vectorul $\mathbf{x}^{(k+2)} - \mathbf{x}^{(k+1)}$, pentru orice $k \geq 0$.

Teorema 14. Dacă $\nabla f \left(\mathbf{x}^{(k)} \right) \neq \mathbf{0}$, atunci $f\left(\mathbf{x}^{(k+1)} \right) < f\left(\mathbf{x}^{(k)} \right)$.

Problema 1. Să se minimizeze funcţia

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

unde $\mathbf{x}^{(0)} = (2, 3)^T$.

Soluţie.

$$\begin{aligned}
&\nabla f(x_1, x_2) = (4x_1 - 2x_2, 2x_2 - 2x_1)^T \\
&\nabla f\left(\mathbf{x}^{(0)} \right) = (2, 2)^T \\
&\alpha_0 = \arg \min_{\alpha \geq 0} f\left((2,3)^T - \alpha (2,2)^T \right) \\
&\quad = \arg \min_{\alpha \geq 0} f\left((2 - 2\alpha, 3 - 2\alpha)^T \right) \\
&\quad = \arg \min_{\alpha \geq 0} \left(2(2-2\alpha)^2 - 2(2-2\alpha)(3-2\alpha) + (3-2\alpha)^2 \right) \\
&\quad = \arg \min_{\alpha \geq 0} \left(4\alpha^2 - 16\alpha + 5 \right) = 2 \\
&\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - 2\nabla f\left(\mathbf{x}^{(0)} \right) = (-2, -1)^T \text{ etc.}
\end{aligned}$$

Problema 2. Să se minimizeze funcţia

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - 4)^4 + (x_2 - 4)^2 + 4(x_3 + 5)^4,$$

unde $\mathbf{x}^{(0)} = (4, 2, -1)^T$.

Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică pozitiv definită, şi $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\,\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}$$

Notăm $\mathbf{g}^{(k)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$.

Avem
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{g}^{(k)},$$
unde
$$\begin{aligned}\alpha_k &= \arg\min_{\alpha\geq 0} f\left(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha\mathbf{g}^{(k)}\right)\\ &= \arg\min_{\alpha\geq 0}\left(\tfrac{1}{2}\left(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha\mathbf{g}^{(k)}\right)^T Q\left(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha\mathbf{g}^{(k)}\right) - \mathbf{b}^T\left(\mathbf{x}^{(k)} - \alpha\mathbf{g}^{(k)}\right)\right).\end{aligned}$$

Se obţine
$$\alpha_k = \frac{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T\mathbf{g}^{(k)}}{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T Q\,\mathbf{g}^{(k)}}.$$

Algoritmul celei mai abrupte descreşteri
(The Method of Steepest Descent)

Fie $\mathbf{x}^{(0)}$, un punct de pornire.

Atunci
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \frac{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T\mathbf{g}^{(k)}}{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T Q\,\mathbf{g}^{(k)}}\mathbf{g}^{(k)}, \quad k = 0, 1, ...,$$
unde
$$\mathbf{g}^{(k)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) = Q\,\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}.$$

Teorema 15. Avem $\mathbf{x}^{(k)} \to \mathbf{x}^*$, pentru orice $\mathbf{x}^{(0)}$.

Teorema 16. Are loc inegalitatea
$$f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) - f(\mathbf{x}^*) \leq \left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2\left(f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) - f(\mathbf{x}^*)\right),$$
unde $\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ este numărul de condiţionare al matricei Q în raport cu norma spectrală.

Teorema 17. Fie $f \in C^2$. Presupunem că iteraţiile metodei gradient, generate cu procedura de căutare ideală a pasului, converge la un punct, $\mathbf{x}^*$, pentru care matricea $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ este pozitiv definită. Fie un scalar, $\beta \in \left(\left(\frac{\kappa-1}{\kappa+1}\right)^2, 1\right)$, unde κ este numărul de condiţionare al matricei $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ în raport cu norma spectrală. Atunci, pentru k suficient de mare, avem
$$f\left(\mathbf{x}^{(k+1)}\right) - f(\mathbf{x}^*) \leq \beta\left(f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) - f(\mathbf{x}^*)\right).$$

4. Metode de direcţii conjugate

4.1. Noţiuni generale

Definiţia 18. Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică. Spunem că direcţiile $\mathbf{d}^{(0)}$, $\mathbf{d}^{(1)}$, ..., $\mathbf{d}^{(m)}$ sunt $Q-$*conjugate* (sau $Q-$*ortogonale*) dacă

$$\left(\mathbf{d}^{(i)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(j)} = 0, \quad \text{pentru orice } i \neq j.$$

Propoziţia 19. Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică pozitiv definită. Dacă direcţiile $\mathbf{d}^{(0)}, \mathbf{d}^{(1)}, ..., \mathbf{d}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$, cu $k \leq n-1$, sunt nenule şi $Q-$conjugate, atunci acestea sunt liniar independente.

Algoritmul Gram–Schmidt (variantă)

Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică pozitiv definită, şi $\left\{\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, ..., \mathbf{p}^{(n-1)}\right\}$, o familie de vectori liniar independenţi din $\mathbb{R}^n$.

Construim vectorii

$$\begin{aligned}
\mathbf{d}^{(0)} &= \mathbf{p}^{(0)}, \\
\mathbf{d}^{(k+1)} &= \mathbf{p}^{(k+1)} - \sum_{i=0}^{k} \frac{\left(\mathbf{p}^{(k+1)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(i)}}{\left(\mathbf{d}^{(i)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(i)}} \mathbf{d}^{(i)}.
\end{aligned}$$

Atunci vectorii $\mathbf{d}^{(0)}, \mathbf{d}^{(1)}, ..., \mathbf{d}^{(n-1)}$ sunt $Q-$conjugaţi.

Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică pozitiv definită, şi $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}$$

4.2. Algoritmul direcţiilor conjugate

Fie $\mathbf{x}^{(0)}$, un punct de pornire, şi $\mathbf{d}^{(0)}, \mathbf{d}^{(1)}, ..., \mathbf{d}^{(n-1)}$, n direcţii $Q-$conjugate.

Pentru $k = 0, 1, ...$, considerăm

$$\mathbf{g}^{(k)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) = Q\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}$$

şi

$$\alpha_k = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)}}{\left(\mathbf{d}^{(k)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(k)}}.$$

Atunci

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{d}^{(k)}.$$

Teorema 20. Pentru orice punct de pornire, $\mathbf{x}^{(0)}$, algoritmul anterior converge la un unic punct, $\mathbf{x}^*$, soluţie a sistemului $Q\mathbf{x} = \mathbf{b}$, în n paşi (i.e., $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^{(n)}$).

<u>Problema 4.</u> Să se minimizeze

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

folosind metoda direcţiei conjugate, cu $\mathbf{x}^{(0)} = (0,0)^T$, $\mathbf{d}^{(0)} = (1,0)^T$ şi $\mathbf{d}^{(1)} = \left(-\frac{3}{8}, \frac{3}{4}\right)^T$.

Soluţie.

$\mathbf{g}^{(0)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) = -\mathbf{b} = (1,-1)^T$

$\alpha_0 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(0)}\right)^T \mathbf{d}^{(0)}}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(0)}} = -\frac{(1,-1)\binom{1}{0}}{(1,0)\left(\begin{smallmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{smallmatrix}\right)\binom{1}{0}} = -\frac{1}{4}$

$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0\mathbf{d}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\mathbf{g}^{(1)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right) = Q\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(1)}\right)^T \mathbf{d}^{(1)}}{\left(\mathbf{d}^{(1)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(1)}} = -\frac{\left(0, -\frac{3}{2}\right)\begin{pmatrix} -\frac{3}{8} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}}{\left(-\frac{3}{8}, \frac{3}{4}\right)\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{3}{8} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}} = 2$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} + \alpha_1\mathbf{d}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ 0 \end{pmatrix} + 2\begin{pmatrix} -\frac{3}{8} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix} = \mathbf{x}^*$$

4.3. Metoda gradienţilor conjugaţi

Fie $Q \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, o matrice simetrică pozitiv definită, şi $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}$$

Algoritmul gradienţilor conjugaţi

Fie $\mathbf{x}^{(0)}$, un punct de pornire.
Alegem

$$\mathbf{d}^{(0)} = -\nabla f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right) = -\mathbf{g}^{(0)}.$$

Atunci $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0\mathbf{d}^{(0)}$, unde

$$\alpha_0 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(0)}\right)^T \mathbf{d}^{(0)}}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(0)}}.$$

La pasul k:

$$\mathbf{g}^{(k)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right),$$

$$\mathbf{d}^{(k)} = -\mathbf{g}^{(k)} + \beta_{k-1}\mathbf{d}^{(k-1)},$$

unde

$$\beta_{k-1} = \frac{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(k-1)}}{\left(\mathbf{d}^{(k-1)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(k-1)}}.$$

Considerăm

$$\alpha_k = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T \mathbf{d}^{(k)}}{\left(\mathbf{d}^{(k)}\right)^T Q\mathbf{d}^{(k)}}.$$

Atunci $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k\mathbf{d}^{(k)}$.

Propoziţia 21. În algoritmul gradienţilor conjugaţi, direcţiile $\mathbf{d}^{(0)}, \mathbf{d}^{(1)}, ..., \mathbf{d}^{(n-1)}$ sunt $Q-$conjugate.

<u>Problema 5.</u> Să se minimizeze

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{3}{2}x_1^2 + 2x_2^2 + \frac{3}{2}x_3^2 + x_1x_3 + 2x_2x_3 - 3x_1 - x_3,$$

folosind metoda gradientului conjugat, cu $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0)^T$.

Soluţie.

$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x}$, cu $Q = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ şi $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = Q\mathbf{x} - \mathbf{b} =$

$= (3x_1 + x_3 - 3, 4x_2 + 2x_3, x_1 + 2x_2 + 3x_3 - 1)^T$
$\mathbf{g}^{(0)} = (-3, 0, -1)^T$
$\mathbf{d}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$
$\alpha_0 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(0)}\right)^T \mathbf{d}^{(0)}}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(0)}} = \frac{10}{36} = 0,2778$
$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \alpha_0 \mathbf{d}^{(0)} = (0,8333; 0; 0,2778)^T$
$\mathbf{g}^{(1)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right) = (-0,2222; 0,5556; 0,6667)^T$
$\beta_0 = \frac{\left(\mathbf{g}^{(1)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(0)}}{\left(\mathbf{d}^{(0)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(0)}} = 0,08025$
$\mathbf{d}^{(1)} = -\mathbf{g}^{(1)} + \beta_0 \mathbf{d}^{(0)} = (0,4630; -0,5556; -0,5864)^T$
$\alpha_1 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(1)}\right)^T \mathbf{d}^{(1)}}{\left(\mathbf{d}^{(1)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(1)}} = 0,2187$
$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} + \alpha_1 \mathbf{d}^{(1)} = (0,9346; -0,1215; 0,1495)^T$
$\mathbf{g}^{(2)} = \nabla f\left(\mathbf{x}^{(2)}\right) = (-0,04673; -0,1869; 0,1402)^T$
$\beta_1 = \frac{\left(\mathbf{g}^{(2)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(1)}}{\left(\mathbf{d}^{(1)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(1)}} = 0,07075$
$\mathbf{d}^{(2)} = -\mathbf{g}^{(2)} + \beta_1 \mathbf{d}^{(1)} = (0,07948; 0,1476; -0,1817)^T$
$\alpha_2 = -\frac{\left(\mathbf{g}^{(2)}\right)^T \mathbf{d}^{(2)}}{\left(\mathbf{d}^{(2)}\right)^T Q \mathbf{d}^{(2)}} = 0,8231$
$\mathbf{x}^{(3)} = \mathbf{x}^{(2)} + \alpha_2 \mathbf{d}^{(2)} = (1,000; 0,000; 0,000)^T = \mathbf{x}^*$

5. Stochastic gradient descent

Se consideră un set de date, $\{(\mathbf{a}_i, y_i)\}_{i=\overline{1,n}}$, cu $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^d$ şi $y_i \in \mathbb{R}$, ce urmează o distribuţie necunoscută.

Problema de optimizare:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} \quad f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell\left(h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i), y_i\right)$$

Exemple de funcţii de pierdere („loss functions”):

- „square loss”: $\ell\left(h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i), y_i\right) = \left(y_i - h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)\right)^2$;
- „cross–entropy loss”: $\ell\left(h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i), y_i\right) = -y_i \ln h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i) - (1 - y_i) \ln\left(1 - h(\mathbf{x}, \mathbf{a}_i)\right)$.

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \nabla f_i(\mathbf{x})$$

$$\nabla f(\mathbf{x}) \approx \tfrac{1}{|\mathcal{I}|} \textstyle\sum_{i \in \mathcal{I}} \nabla f_i(\mathbf{x}),$$

unde $\mathcal{I}$ este o submulţime aleatoare a lui $\{1, 2, ..., n\}$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \cdot \frac{1}{|\mathcal{I}|} \sum_{i \in \mathcal{I}} \nabla f_i(\mathbf{x})$$

Propoziţia 22. Presupunem că elementele lui $\mathcal{I}$ sunt variabile aleatoare i.i.d. ce urmează o distribuţie uniformă pe $\{1, 2, ..., n\}$. Atunci gradientul stocastic este un estimator nedeplasat al gradientului complet, i.e.,

$$E\left(\frac{1}{|\mathcal{I}|} \sum_{i \in \mathcal{I}} \nabla f_i(\mathbf{x})\right) = \nabla f(\mathbf{x}).$$

„32 could be a good default value for the mini-batch size”
Referinţă: Yoshua Bengio, Practical recommendations for gradient–based training of deep architectures, în Grégoire Montavon, Geneviève B. Orr, Klaus–Robert Müller (eds.), *Neural networks: Tricks of the trade*, pp. 437–478, Springer, 2012.

6. Gradient descent with momentum

$$\mathbf{m}^{(k+1)} = \gamma_k \mathbf{m}^{(k)} + (1-\gamma_k) \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{m}^{(k+1)}$$

sau, echivalent,

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \widetilde{\alpha}_k \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \widetilde{\beta}_k \left(\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\right),$$

unde

$$\widetilde{\alpha}_k = \alpha_k (1-\gamma_k) \quad \text{şi} \quad \widetilde{\beta}_k = \tfrac{\alpha_k \gamma_k}{\alpha_{k-1}}.$$

7. Nesterov's Accelerated Gradient

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \alpha_k \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)} + \beta_k\left(\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\right)\right) + \beta_k\left(\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\right)$$

Propoziţia 23. Fie $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, o funcţie convexă, de clasă C^1, cu gradientul $L-$Lipschitz continuu. Fie $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}^{(-1)} = \mathbf{x}^{(0)}$, $\alpha_k = \frac{1}{L}$, $\lambda_{-1} = 0$, $\lambda_k = \frac{1+\sqrt{1+4\lambda_{k-1}^2}}{2}$ şi $\beta_k = \frac{\lambda_{k-1}-1}{\lambda_k}$, pentru orice $k \geq 0$. Atunci, pentru orice $k \geq 0$, are loc inegalitatea

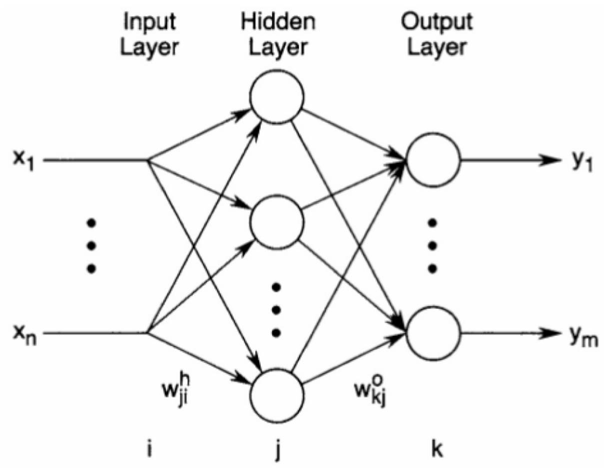
$$f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) - f\left(\mathbf{x}^*\right) \leq \frac{2L}{(k+1)^2}\left\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\right\|^2.$$

8. Reţele neuronale artificiale – Algoritmul Backpropagation

Problemă de optimizare

Pornind de la un set de date, $\{(\mathbf{x}_{d,i}, \mathbf{y}_{d,i})\}_{i=\overline{1,p}} \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$, se caută o funcţie, $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, care să minimizeze un criteriu de eroare, de exemplu, suma pătratelor erorilor:

$$\sum_{i=1}^{p} \left(\mathbf{y}_{d,i} - F\left(\mathbf{x}_{d,i}\right)\right)^2.$$



$$v_j = \sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_i$$

$$z_j = f_j^h\left(v_j\right) = f_j^h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_i\right)$$

$$\begin{aligned} y_s &= f_s^o\left(\sum_{j=1}^{l} w_{sj}^o z_j\right) \\ &= f_s^o\left(\sum_{j=1}^{l} w_{sj}^o f_j^h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_i\right)\right), \quad s = \overline{1,m} \end{aligned}$$

$$\left(\mathbf{x}_d, \mathbf{y}_d\right) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$$

$$\min_{w_{ji}^h, w_{sj}^o} \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - y_s\right)^2$$

$$\mathbf{w} = \left\{w_{ji}^h, w_{sj}^o : i = \overline{1,n}, j = \overline{1,l}, s = \overline{1,m}\right\}$$

$$\begin{aligned} E\left(\mathbf{w}\right) &= \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - y_s\right)^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - f_s^o\left(\sum_{j=1}^{l} w_{sj}^o f_j^h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_{di}\right)\right)\right)^2 \end{aligned}$$

<u>Calculăm</u> $\frac{\partial E}{\partial w_{sj}^o}$:

$$E\left(\mathbf{w}\right) = \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - f_s^o\left(\sum_{j=1}^{l} w_{sj}^o z_j\right)\right)^2$$

$$z_j = f_j^h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_{di}\right), \quad j = \overline{1,l}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{sj}^o}\left(\mathbf{w}\right) = -\left(y_{ds} - y_s\right) f_s^{o\,\prime}\left(\sum_{q=1}^{l} w_{sq}^o z_q\right) z_j$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{sj}^o}\left(\mathbf{w}\right) = -\delta_s z_j$$

<u>Calculăm</u> $\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^h}$:

$$E\left(\mathbf{w}\right) = \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - f_s^o\left(\sum_{j=1}^{l} w_{sj}^o f_j^h\left(\sum_{i=1}^{n} w_{ji}^h x_{di}\right)\right)\right)^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^h}\left(\mathbf{w}\right) = -\sum_{s=1}^{m}\left(y_{ds} - y_s\right) f_s^{o\,\prime}\left(\sum_{q=1}^{l} w_{sq}^o z_q\right) w_{sj}^o f_j^{h\,\prime}\left(\sum_{r=1}^{n} w_{jr}^h x_{dr}\right) x_{di}$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ji}^{h}}(\mathbf{w}) = -\left(\sum_{s=1}^{m} \delta_s w_{sj}^{o}\right) f_j^{h\,\prime}(v_j)\, x_{di}$$

Algoritmul Backpropagation

$$\begin{aligned}
w_{sj}^{o(k+1)} &= w_{sj}^{o(k)} + \eta \delta_s^{(k)} z_j^{(k)} \\
w_{ji}^{h(k+1)} &= w_{ji}^{h(k)} + \eta \left(\sum_{s=1}^{m} \delta_s^{(k)} w_{sj}^{o(k)}\right) f_j^{h\,\prime}\left(v_j^{(k)}\right) x_{di} \\
v_j^{(k)} &= \sum_{i=1}^{n} w_{ji}^{h(k)} x_{di} \\
z_j^{(k)} &= f_j^{h}\left(v_j^{(k)}\right) \\
y_s^{(k)} &= f_s^{o}\left(\sum_{q=1}^{l} w_{sq}^{o(k)} z_q^{(k)}\right) \\
\delta_s^{(k)} &= \left(y_{ds} - y_s^{(k)}\right) f_s^{o\,\prime}\left(\sum_{q=1}^{l} w_{sq}^{o(k)} z_q^{(k)}\right)
\end{aligned}$$

9. Metoda lui Newton

$$f(\mathbf{x}) \approx \underbrace{f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \left(\mathbf{g}^{(k)}\right)^T \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right) + \frac{1}{2}\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right)^T \nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right)}_{q(\mathbf{x})}$$

$$\mathbf{0} = \nabla q(\mathbf{x}) = \mathbf{g}^{(k)} + \nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right)$$

Presupunem că $\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) \succ 0$.
Atunci

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\right)^{-1} \mathbf{g}^{(k)}.$$

Teorema 24. (Convergenţa locală pătratică a metodei Newton) Fie $f \in C^2$ şi $\mathbf{x}^*$, un punct de minim local, ce satisface condiţiile suficiente de ordinul al doilea (i.e., $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ şi $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \succ 0$). Fie $l > 0$ astfel încât $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \succeq l I_n$. Presupunem că $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ este Lipschitz, i.e., există $M > 0$ astfel încât $\left\|\nabla^2 f(\mathbf{x}) - \nabla^2 f(\mathbf{y})\right\| \leq M\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$, pentru orice $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Dacă $\mathbf{x}^{(0)}$ este suficient de aproape de $\mathbf{x}^*$, i.e., $\left\|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}^*\right\| \leq \frac{2}{3} \cdot \frac{l}{M}$, atunci iteraţia Newton $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\right)^{-1} \nabla f\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$ are proprietatea că şirul generat $\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)_{k \geq 0}$ converge la $\mathbf{x}^*$ cu rata pătratică, mai precis, $\left\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^*\right\| \leq \frac{3M}{2l}\left\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^*\right\|^2$, pentru orice $k \geq 0$.

<u>Problema 7.</u> Să se minimizeze funcţia lui Powell

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4,$$

unde $\mathbf{x}^{(0)} = (3, -1, 0, 1)^T$.
Soluţie.

$$f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right)=215$$
$$\nabla f(\mathbf{x})=\begin{pmatrix}2(x_1+10x_2)+40(x_1-x_4)^3\\20(x_1+10x_2)+4(x_2-2x_3)^3\\10(x_3-x_4)-8(x_2-2x_3)^3\\-10(x_3-x_4)-40(x_1-x_4)^3\end{pmatrix}$$
$$\nabla^2 f(\mathbf{x})=$$
$$\begin{pmatrix}2+120(x_1-x_4)^2 & 20 & 0 & -120(x_1-x_4)^2\\20 & 200+12(x_2-2x_3)^2 & -24(x_2-2x_3)^2 & 0\\0 & -24(x_2-2x_3)^2 & 10+48(x_2-2x_3)^2 & -10\\-120(x_1-x_4)^2 & 0 & -10 & 10+120(x_1-x_4)^2\end{pmatrix}$$
$$\mathbf{g}^{(0)}=(306,-144,-2,-310)^T$$
$$\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right)=\begin{pmatrix}482 & 20 & 0 & -480\\20 & 212 & -24 & 0\\0 & -24 & 58 & -10\\-480 & 0 & -10 & 490\end{pmatrix}$$
$$\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right)\right)^{-1}=\begin{pmatrix}0,1126 & -0,0089 & 0,0154 & 0,1106\\-0,0089 & 0,0057 & 0,0008 & -0,0087\\0,0154 & 0,0008 & 0,0203 & 0,0155\\0,1106 & -0,0087 & 0,0155 & 0,1107\end{pmatrix}$$
$$\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right)\right)^{-1}\mathbf{g}^{(0)}=(1,4127;-0,8413;-0,2540;0,7460)^T$$
$$\mathbf{x}^{(1)}=\mathbf{x}^{(0)}-\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(0)}\right)\right)^{-1}\mathbf{g}^{(0)}=(1,5873;-0,1587;0,2540;0,2540)^T$$
$$f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right)=31,8$$
$$\mathbf{g}^{(1)}=(94,81;-1,179;2,371;-94,81)^T$$
$$\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right)=\begin{pmatrix}215,3 & 20 & 0 & -213,3\\20 & 205,3 & -10,67 & 0\\0 & -10,67 & 31,34 & -10\\-213,3 & 0 & -10 & 223,3\end{pmatrix}$$
$$\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right)\right)^{-1}\mathbf{g}^{(1)}=(0,5291;-0,0529;0,0846;0,0846)^T$$
$$\mathbf{x}^{(2)}=\mathbf{x}^{(1)}-\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(1)}\right)\right)^{-1}\mathbf{g}^{(1)}=(1,0582;-0,1058;0,1694;0,1694)^T$$
$$f\left(\mathbf{x}^{(2)}\right)=6,28$$
$$\mathbf{g}^{(2)}=(28,09;-0,3475;0,7031;-28,08)^T$$
$$\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(2)}\right)=\begin{pmatrix}96,80 & 20 & 0 & -94,80\\20 & 202,4 & -4,744 & 0\\0 & -4,744 & 19,49 & -10\\-94,80 & 0 & -10 & 104,80\end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}^{(3)}=\mathbf{x}^{(2)}-\left(\nabla^2 f\left(\mathbf{x}^{(2)}\right)\right)^{-1}\mathbf{g}^{(2)}=(0,7037;-0,0704;0,1121;0,1111)^T$$
$$f\left(\mathbf{x}^{(3)}\right)=1,24$$

10. Introducere în programare liniară

10.1. Noţiuni generale

Scop. Determinarea valorilor variabilelor de decizie care minimizează/maximizează o funcţie obiectiv liniară, atunci când variabilele de decizie sunt supuse unor constrângeri liniare.

Forma standard a unei probleme de programare liniară

$$\begin{aligned}\text{minimizaţi}\quad & \mathbf{c}^T\mathbf{x}\\ \text{supusă la}\quad & A\mathbf{x}=\mathbf{b}\\ & \mathbf{x}\geq 0\end{aligned}$$

unde $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})$ şi $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, cu $m < n$ şi $\operatorname{rang} A = m$.

Scriem $A = (B \mid D)$, cu $B \in \mathcal{M}_m(\mathbb{R})$, inversabilă, şi $D \in \mathcal{M}_{m,n-m}(\mathbb{R})$.

Soluţia ecuaţiei $B\mathbf{x}_B = \mathbf{b}$ este $\mathbf{x}_B = B^{-1}\mathbf{b}$.

Definiţiile 25.

- Vectorul $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_B^T, \mathbf{0}^T)^T$ se numeşte *soluţie de bază* a sistemului $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ în raport cu baza B.
- Componentele vectorului $\mathbf{x}_B$ se numesc *variabile de bază* şi coloanele matricei B se numesc *coloane de bază*.
- Dacă anumite variabile de bază ale unei soluţii de bază sunt nule, atunci soluţia de bază respectivă se numeşte *soluţie de bază degenerată*.
- Un vector, $\mathbf{x}$, ce satisface $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ şi $\mathbf{x} \geq 0$ se numeşte *soluţie fezabilă*.
- O soluţie fezabilă ce este şi soluţie de bază se numeşte *soluţie fezabilă de bază*.
- O soluţie fezabilă de bază ce este şi soluţie de bază degenerată se numeşte *soluţie fezabilă de bază degenerată*.

Definiţiile 26.

- Orice vector, $\mathbf{x}$, pentru care se atinge valoarea minimă a funcţiei obiectiv, $\mathbf{c}^T\mathbf{x}$, pe mulţimea vectorilor ce satisfac constrângerile $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ şi $\mathbf{x} \geq 0$, se numeşte *soluţie fezabilă optimă*.
- O soluţie fezabilă optimă ce este şi soluţie de bază se numeşte *soluţie fezabilă de bază optimă*.

Teorema 27. (Teorema fundamentală a programării liniare)

- Orice problemă de programare liniară se încadrează în exact una dintre următoarele trei situaţii:
  1. nu este fezabilă;
  2. are o soluţie fezabilă optimă;
  3. este nemărginită.
- Dacă există o soluţie fezabilă, atunci există şi o soluţie fezabilă de bază.
- Dacă există o soluţie fezabilă optimă, atunci există şi o soluţie fezabilă de bază optimă.

Teorema 28. (Interpretare geometrică) Fie Ω, mulţimea convexă formată din toate soluţiile fezabile. Atunci $\mathbf{x}$ este un punct extremal al lui Ω dacă şi numai dacă $\mathbf{x}$ este o soluţie fezabilă de bază.

10.2. Algoritmul Simplex

1. Se transformă constrângerile problemei de programare liniară într-un sistem de ecuaţii liniare.
2. Se construieşte tabloul simplex iniţial. Se scrie funcţia obiectiv pe ultimul rând.
3. Valoarea negativă (dacă există) din ultimul rând, de valoare absolută maximă, desemnează coloana pivot.
4. Se împarte fiecare linie la elementul acesteia (doar dacă acesta din urmă este pozitiv), situat în coloana pivot. Apoi, se determină cel mai mic termen liber din ultima coloană. Elementul situat la intersecţia dintre linia acestuia din urmă şi coloana pivot reprezintă elementul pivot.
5. Toate elementele de pe coloana pivot, cu excepţia elementului pivot, se fac egale cu zero prin metoda lui Gauss.
6. Dacă există valori negative pe ultimul rând, se repetă paşii 3–5. Raţionamentul se opreşte atunci când nu mai există valori negative pe ultimul rând.

Problema 10

$$\begin{aligned} \text{maximizaţi} \quad & 13x_1 + 23x_2 \\ \text{supusă la} \quad & 5x_1 + 15x_2 \leq 480 \\ & 4x_1 + 4x_2 \leq 160 \\ & 35x_1 + 20x_2 \leq 1190 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

Bibliografie

[1] Stephen Boyd, Lieven Vandenberghe, *Convex Optimization*, Cambridge University Press, 2004.

[2] Edwin K.P. Chong, Stanislaw H. Zak, *An Introduction to Optimization*, Wiley, 2013.

[3] Ion Necoară, *Metode de optimizare numerică*, Editura Politehnica Press, 2013.

[4] Yurii Nesterov, *Lectures on Convex Optimization*, Springer, 2018.

[5] Jorge Nocedal, Stephen J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer, 2006.