NUMERIČKA OPTIMIZACIJA ZA PROBLEME BEZ OGRANIČENJA

Skripta za predmet Numerička optimizacija I

Nataša Krejić

Tempus JEP CD Project 17017-2002 "Mathematics curricula for technological development"

Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Departman za matematiku i informatiku

Novi Sad 2004

Literatura:

1. Nocedal, J., Wright S.J., Numerical Optimization, Springer, 1999

2. Denis, J.E.Jr., Schnabel, R.B., Numerical Methods for Unconstrained optimization and Nonlinear Equations

Pregled kursa

- 20 časova predavanja - 10 nedelja po 2 časa
- Osnovni algoritmi za rešavanje problema minimizacije nelinearnih funkcija bez ograničenja
  - Uvod
  - Teorijske osnove nelinearne optimizacije
  - Pregled algoritama - trust region i line search
  - Metode linijskog pretraživanja
  - Metode oblasti poverenja
  - Metod konjugovanih gradijenata
  - Njutnov metod i njegove primene
  - Kvazi-Njutnovi metodi
  - Algoritmi za probleme velikih dimenzija
  - Metod najmanjih kvadrata
  - Rešavanje sistema nelinearnih jednačina

Primer 1. Optimizacija portfolia

n - broj mogućih investicija, prinos na investiciju i je r_i. Prinosi su slučajne promenljive sa normalnom raspodelom, očekivanjem μ_i i varijansom σ_i,

$$\mu_i = E[r_i], \quad \sigma_i^2 = E[(r_i - \mu_i)^2].$$

Pretpostavljamo da će se sav raspoloživi kapital investirati i da nema short-selling-a. Prinos portfolia je

$$R = \Sigma_{i=1}^n r_i x_i$$

sa očekivanjem $E[R] = E[\Sigma_{i=1}^n x_i r_i] = \sum_{i=1}^n x_i E[r_i] = x^T \mu$. Ako su kovarijanse ρ_{ij},

$$\rho_{ij} = \frac{E[(r_i - \mu_i)(r_j - \mu_j)]}{\sigma_i \sigma_j}$$

za matricu $G = [G_{ij}]$, $G_{ij} = \rho_{ij}\sigma_i\sigma_j$ je varijansa portfolia

$$E[(R - E[R])^2] = x^T G x.$$

Za κ parametar tolerancije rizika problem investitora je

$$\max x^T \mu - \kappa x^T G x, \quad \sum_{i=1}^n x_i = 1, \; x \geq 0.$$

Primer 2. Transportni problem

Dva postrojenja F_1, F_2 i dvanaest veletrgovina $R_1, \ldots R_{12}$. Ako je a_i nedeljni kapacitet postrojenja F_i, b_j nedeljna tražnja trgovine R_j, uztransportne troškove c_{ij} i x_{ij} količinu iz postrojenja i u trgovinu j imamo matematički zapis

$$\min \sum_{i,j} c_{ij} x_{ij}, \quad \sum_{j=1}^{12} x_{ij} \leq a_i, \; i{-}1, 2, \quad \sum_{j=1}^{12} x_{ij} \geq b_j, j{-}1, \ldots, 12, \quad x_{ij} \geq 0$$

GLAVA 1

Teorijske osnove algoritama

Problem minimizacije bez ograničenja

$$\min_x f(x)$$

gde je $f : R^n \to R$ glatka funkcija - **funkcija cilja**, a $x \in R^n$, $n \geq 1$ - **vektor promenljivih**.

Rešenje - globalno i lokalno (slabo i jako)

Tačka x^* je **globalni minimum** ako je

$$f(x^*) \leq f(x)$$

za sve x.

Tačka x^* je **lokalni (slabi) minimum** ako postoji okolina $N(x^*)$ tako da je

$$f(x^*) \leq f(x), \quad x \in N(x^*).$$

Tačka x^* je **strogi lokalni minimum** ako postoji okolina $N(x^*)$ tako da je

$$f(x^*) < f(x), \quad x \in N(x^*), x \neq x^*.$$

Tačka x^*je **izolovani lokalni minimum** ako postoji okolina $N(x^*)$ tako da je x^* jedini lokalni minimum u N.

Tipična situacija: više lokalnih minimuma, od kojih je samo jedan globalni!

Konveksne funkcije: svaki loklani minimum je ujedno i globalni minimum.

Potrebni i dovoljni uslovi za minimum - zasnovani na Taylorovoj teoremi

TEOREMA 1. *Neka je $f : R^n \to R$ neprekidno diferencijabilna funkcija i $p \in R^n$. Tada je*

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+tp)^T p,$$

za neko $t \in (0,1)$. Ako je $f \in C^2(R^n)$ onda je

$$\nabla f(x+p) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp) p dt$$

i

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp)p,$$

za neko $t \in (0,1)$.

TEOREMA 2. *(potrebni uslovi prvog reda) Ako je* x^**lokalni minimum i* $f \in C^2$ *u otvorenoj okolini tačke* x^* *onda je*

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

Tačke sa osobinom

$$\nabla f(x) = 0$$

se nazivaju **stacionarne** tačke.

TEOREMA 3. *(potrebni uslovi drugog reda) Ako je* x^* *lokalni minimum i* $\nabla^2 f(x^*)$ *neprekidno u otvorenoj okolini* x^* *onda je*

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad i \quad \nabla^2 f(x^*) \quad \textit{je pozitivno semidefinitna matrica.}$$

TEOREMA 4. *(dovoljni uslovi drugog reda) Neka je* $\nabla^2 f(x^*)$ *neprekidno u otvorenoj okolini* x^* *i* $\nabla f(x^*0 = 0$, *a* $\nabla^2 f(x^*)$ *pozitivno definitna matrica. Tada je* x^* *strogi lokalni minimum.*

TEOREMA 5. *(konveksne funkcije) Ako je* f *konveksna funkcija onda je svaki loklani minimum* x^* *ujedno i globalni minimum. Ako je* f *i diferencijabilna funkcija onda je svaka stacionarna tačka globalni minimum funckije* f.

Algoritmi za minimizaciju

- iterativni
- monotoni - opadajuća vrednost funkcije u svakom koraku
- nemonotoni - opadajuća vrednost funkcije nakon odredjenog broja koraka
- izbor početne aproksimacije
- kriterijum zaustavljanja

Dva osnovna pristupa: **line search** (linijsko pretraživanje) i **trust region** (oblasti poverenja).

Linijsko pretraživanje

- pravac traženja p_k
- nova iteracija $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ u kojoj funkcija ima manju vrednost.
- dužina koraka

$$\alpha_k = \arg\min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha p_k).$$

- tačna minimizacija i približna minimizacija (odredjeni broj probnih koraka)

Oblasti poverenja

- model funkcija m_k
- minimizira se m_k u nekoj okolini trenutne iteracije

$$\min_p m_k(x_k + p), \quad \|p\| \leq \Delta$$

- nedovoljan napredak (redukcija vrednosti funkcije cilja) implicira smanjenje oblasti poverenja
- nova iteracija $x_{k+1} = x_k + p_k$
- standarna model funkcija - kvadratna aproksimacija

$$m_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p,$$

gde je B_k hesijan ili neka njegova aproksimacija

GLAVA 2

LINIJSKO PRETRAŽIVANJE

Nova iteracija

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

gde je $\alpha_k -$ dužina koraka, a p_k pravac

Opadajući pravac

$$p_k^T \nabla f_k < 0$$

$$\begin{aligned} p_k &= -B_k^{-1} \nabla f_k, \quad B_k - PD \\ B_k &= I - \text{metod najbržeg pada} \\ B_k &= \nabla^2 f_k - \quad \text{Njutnov metod} \\ B_k &\approx \nabla^2 f_k - \quad \text{kvazi-Njutnovi metodi} \end{aligned}$$

Dužina koraka

Idealno rešenje: - globalni minumum funkcije ϕ (teško!)

$$\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k), \quad \alpha > 0$$

Tipičan algoritam : provera niza kandidata za α i prihvatanje onog koji obezbedjuje dovoljno smanjenje vrednosti funkcije

Nije dovoljno da je $f(x_{k+1}) < f(x_k)$! Primer: $f(x) = (x-1)^2 - 1$ i niz $x_k = 5/k$. Tada je $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, $\lim_{k\to\infty} x_k = 0$, $f(0) = 0$, a minimum funkcije je $f^* = -1$.

Wolf-ovi uslovi:

1. uslov dovoljnog pada

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 \nabla f_k^T p_k, \quad c_1 \in (0,1)$$

2. uslov krivine

$$\nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k, \quad c_2 \in (c_1, 1)$$

Uslov dovoljnog pada se naziva i Armijo pravilo. Uslov krivine sprečava da korak bude jako mali.

Strogi Wolf-ovi uslovi

$$f(x_k + \alpha_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 \alpha_k \nabla f_k^T p_k,$$

$$\left| \nabla f(x_k + \alpha_k p_k)^T p_k \right| \geq c_2 \left| \nabla f_k^T p_k \right|.$$

Goldstein-ovi uslovi

$$f_k+(1-c)\alpha_k\nabla f_k^T p_k \leq f(x_k+\alpha_k p_k) \leq f(x_k)+c\alpha_k\nabla f_k^T p_k, \quad c \in (0, 1/2)\,.$$

LEMA 1. *Neka je $f : R^n \to R$ neprekidno diferencijabilna funkcija i neka je p_k opadajući pravac u x_k a f ograničeno sa donje strane po pravcu $\{x_k + \alpha p_k : \alpha > 0\}$. Tada za $0 < c_1 < c_2 < 1$ postoji interval za dužinu koraka tako da su zadovoljeni Wolf-ovi i strogi Wolfovo uslovi.*

Backtracking
Za izabrano $\overline{\alpha} > 0$, $\rho, c \in (0, 1)$ postavi $\alpha \leftarrow \overline{\alpha}$;
repeat

$$\alpha \leftarrow \rho\alpha$$

until

$$f(x_k + \alpha p_k) \leq f(x_k) + c\alpha\nabla f_k^T p_k$$

end repeat. Set $\alpha_k = \alpha$.

1. Konvergencija linijskog pretraživanja

Neka je

$$\cos\theta_k = \frac{-\nabla f_k^T p_k}{\|\nabla f_k\|\,\|p_k\|}.$$

TEOREMA 6. *(Zoutendijk's)Neka je f ograničeno sa donje strane i neprekidno diferencijabilno na otvorenom skupu $\mathcal{N}$ koji sadrži nivo skup $\mathcal{L} = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$, gde je x_0 početna iteracija. Neka su iteracije oblike 1 pri čemu je p_k opadajući pravac a α_k zadovoljava Wolf-ove uslove. Neka je gradijent funkcije ∇f Lipšic neprekidno na $\mathcal{N}$,*

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\,\|x - y\|\,, \quad x, y \in \mathcal{N}.$$

Tada

$$\sum_k \cos^2\theta_k\,\|\nabla f_k\|^2 < \infty.$$

Posledice teoreme:

- Ako je $\cos\theta_k \geq \delta > 0$ onda je $\lim_{k\to\infty} \|\nabla f_k\| = 0$
- Postupka najbržeg pada konvergira jer je $\cos\theta_k = 1$
- Kvazi-Njutnovi pravci sa pozitivno definitnim i uniformno ograničenim matricama B_k i B_k^{-1} zadovoljavaju uslov $\cos\theta_k > M^{-1}$

2. Red konvergencije

Metod najbržeg pada: - idealan slučaj

$$f(x) = \frac{1}{2}x^TQx - b^Tx, \quad Q - SPD.$$

Jedinstveni minimum $x_* : Qx_* = b$! Korak odredjujemo minimizacijom fje ϕ :

$$\alpha_k = -\frac{\nabla f_k^T \nabla f_k}{\nabla f_k Q \nabla f_k},$$

nova iteracija

$$x_{k+1} = x_k - \left(\frac{\nabla f_k^T \nabla f_k}{\nabla f_k Q \nabla f_k}\right)\nabla f_k.$$

Uvodeći težinsku normu sa matricom Q imamo

$$\frac{1}{2}\left\|x - x_*\right\|_Q^2 = f(x) - f(x_*).$$

U ovom slučaju (konveksna kvadratna funkcija) imamo ocenu

$$\left\|x_{k+1} - x_k\right\|_Q^2 \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2 \left\|x_k - x_*\right\|_Q^2.$$

U opštem slučaju važi sledeća teorema.

Teorema 7. *Neka je $f : R^n \to R$ dva puta neprekidno diferencijabilna funkcija i neka iteracije generisane linisjkim pretraživanje uz tačnu minimizaciju convergiraju ka x_* gde je hesijan $\nabla^2 f(x_*)$ pozitivno definitan. Tada je*

$$f(x_{k+1}) - f(x_*) \leq \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}\right)^2 [f(x_k) - f(x_*0],$$

gde su $\lambda_1 \leq \ldots \lambda_n$ kk hesijana $\nabla^2 f(x_*)$.

Kvazi-Njutnovi metodi

Pravac odredjuje iz jednačine

$$p_k = -B_k^{-1}\nabla f_k, \tag{2}$$

gde je B_k neka aproksimacija hesijana.

Teorema 8. *Neka je $f : R^n \to R$ tri puta neprekidno diferencijabilna funkcija. Posmatrajmo iteraciju oblika $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ gde je p_k opadajući pravac a α_k zadovoljava Wolf-ove uslove sa $c_1 < 1/2$.*

Ako niz x_k konvergira ka x_* tako da je $\nabla f(x_*) = 0$ i ako je $\nabla^2 f(x_*)$ pozitivno definitno i ako pravci traženja zadovoljavaju

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|\nabla f_k + \nabla^2 f_k p_k\|}{\|p_k\|} = 0$$

tada važi
korak $\alpha_k = 1$ je dopustiv za sve $k \geq k_0$
ako je $\alpha_k = 1$ za sve $k > k_0$ onda $\{x_k\}$ konvergira ka x_* superlinearno.

Dennis-More-ov uslov je u slučaju kvazi-Njutnovih pravaca ekvivalentan uslovu

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(B_k - \nabla^2 f(x_*))\, p_k\|}{\|p_k\|} = 0 \tag{3}$$

Teorema 9. *Neka je f tri puta neprekidno diferencijabilno i neka su iteracije oblika $x_{k+1} = x_k + p_k$ pri čemu je p_k dato sa 2. Pretpostavimo da niz $\{x_k\}$ konvergira ka x_* gde je $\nabla f(x_*)\nabla =^2 0$ i $f(x_*)$ pozitivno definitna matrica. Tada $\{x_k\}$ konvergira superlinearno ako i samo ako važi uslov 3.*

Njutnov metod.
Pravac traženja se odredjuje iz jednačine

$$p_k = \nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k.$$

Teorema 10. *Neka je f dva puta neprekidno diferencijabilna funkcija i neka je hesijan $\nabla^2 f$ Lipšic neprekidna fja u okolini rešenja x_* u kom važi dovoljni uslovi. Posmatramo iteracije oblika $x_{k+1} = x_k + p_k$, pri čemu je p_k Njutnov pravac. Tada važe sledeća tvrdjenja.*

: *Ako je početna iteracija x_0 dovoljno blizu x_* onda niz konvergira ka x_**
: *konvergencija je kvadratna*
: *niz normi gradijenata $\{\|\nabla f_k\|\}$ konvergira ka nuli kvadratno*

3. Algoritmi za odredjivanje dužine koraka α_k

Primenjuje se približna minimizacija umesto tačne. Tipična procedura se sastoji od dve faze:

(1) lokalizacija (bracketing) - odredjivanje intervala $[a, b]$ u kom se nalazi α_k
(2) selekcija (selection) - odredjivanje konačne dužine koraka.

U fazi selekcije se primenjuju razni algoritmi - inetrpolacija je najčešći tj. umesto odredjivanja minimuma funkcije $\phi(\alpha) = f(x_k + \alpha p_k)$ odredjuje se minimum interpolacionog polinoma (najčešće kubni ili kvadratni polinom).

Početna dužina koraka kod Njutna i kvazi-Njutna je uvek 1 da bi se u krajnjom fazi postigla odgovarajuća brzina.

Algoritam za Wolfove uslove

Koristi se činjenica da (α_{i-1}, α_i) sadrži α_k koje zadovoljava Wolfove uslove ako važi jedan od tri uslova

(1) α_i narušava uslov dovoljnog pada
(2) $\phi(\alpha_i) \geq \phi(\alpha_{i-1})$
(3) $\phi'(\alpha_i) \geq 0$.

Poslednji korak u algoritmu je ekstrapolacija za sledeću probnu tačku α_{i+1} - nije nužno, može se uzeti i $\alpha_{i+1} = \theta\alpha_i$.

Algoritam 1.(Linijsko pretraživanje)
Postavi $\alpha_0 \leftarrow 0$, izaberi $\alpha_1 > 0$ i $\alpha_{\max}$;
$i \leftarrow 1$;
repeat

: Izračunaj $\phi(\alpha_i)$;
: If $\phi(\alpha_i) > \phi(0) + c_1\phi'(0)$ ili $[\phi(\alpha_i) \geq \phi(\alpha_{i-1})$ i $i > 1]$
  : $\alpha_* = zoom(\alpha_{i-1}, \alpha_i)$ and stop;
: Izračunaj $\phi'(\alpha_i)$;
: If $|\phi'(\alpha_i)| \leq -c_2\phi'(0)$
  : set $\alpha_* \leftarrow \alpha_i$ and stop;
: If $\phi'(\alpha_i) \geq 0$
  : set $\alpha_* = zoom(\alpha_i, \alpha_{i-1})$ and stop
: Choose $\alpha_{i+1} \in (\alpha_i, \alpha_{\max})$
: $i \leftarrow i + 1$;

End (repeat).

Algoritam $zoom(\alpha_{lo}, \alpha_{hi})$ se koristi za izbor koraka u intervalu $(\alpha_{lo}, \alpha_{hi})$. Pri tome znamo

(1) interval $(\alpha_{lo}, \alpha_{hi})$ sadrži korake koji zadovoljavaju stroge Wolfove uslove
(2) Broj α_{lo} je onaj koji od svih do tada generisanih koraka koji zadovljavaju uslov dovoljnog para daje najmanju vrednost funkcije
(3) Broj α_{hi} je izabran tako da važi $\phi'(\alpha_{lo})(\alpha_{hi} - \alpha_{lo}) < 0$.

Svaka iteracija ovog algoritma generiše α_j unutar $(\alpha_{lo}, \alpha_{hi})$ i onda zamenjuje jednu od granica tako da prethodne tri osobine važi za novi interval!

Algoritam 2.(zoom)
repeat
: Interpoliraj i odredi novu probnu dužinu α_j izmedju α_{lo} i α_{hi};
: Izračunaj $\phi(\alpha_j)$
: If $\phi(\alpha_j) > \phi(0) + c_1\alpha_j\phi'(0)$ ili $\phi(\alpha_j) \geq \phi(\alpha_{lo})$
  : $\alpha_{hi} \leftarrow \alpha_j$
: else
  : Izračunaj $\phi'(\alpha_j)$
  : If $|\phi'(\alpha_j)| \leq -c_2\phi'(0)$
    : postavi $\alpha_* \leftarrow \alpha_j$ and stop
  : If $\phi'(\alpha_j)(\alpha_{hi} - \alpha_{lo}) \geq 0$
    : $\alpha_{hi} \leftarrow \alpha_{lo}$
  : $\alpha_{lo} \leftarrow \alpha_j$
end (repeat)

GLAVA 3

Kvazi-Njutnovi metodi

1. BFGS metod

Matrica B_k u kvadratnom modelu se ažurira u svakoj iteraciji koristeći prethodnu aproksimaciju hesijana i informacije iz nove iteracije na sledeći način. U novoj iteraciji $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ pravimo model

$$m_{k+1}(p) = f_{k+1} + \nabla f_{k+1}^T p + \frac{1}{2} p^T B_{k+1} p$$

i postavljamo sledeće zahteve:

$$\nabla m_{k+1}(x_k) = \nabla f_k, \quad \nabla m_{k+1}(x_{k+1}) = \nabla f_{k+1}$$

što implicira **jednačinu sečice**

$$B_{k+1} s_k = y_k, \quad s_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = \nabla f_{k+1} - \nabla f_k.$$

Za očuvanje SPD osobine matrice mora da važi **uslov krivine**

$$s_k^T y_k > 0,$$

koji se obezbedjuje pomoću Wolfovih uslova (W2).

Jedinstvenost se obezbedjuje rešavanjem problema minimizacije

$$\begin{aligned} \min_B \|B - B_k\|, \\ B = B^T, \quad B s_k = y_k. \end{aligned} \tag{4}$$

U zavisnosti od izbora norme dobijamo različita rešenja.

Scale-invariant metod dobijamo sa težinskom normom

$$\|A\|_W = \left\| W^{1/2} A W^{1/2} \right\|_F .$$

Ako je $W = \widetilde{G}_k^{-1}$, gde je $\widetilde{G}_k$ srednja vrednost Hesijana,

$$\widetilde{G}_k = \int_0^1 \nabla^2 f(x_k + \tau \alpha_k p_k) d\tau$$

imamo osobinu

$$y_k = \widetilde{G}_k \alpha_k p_k = \widetilde{G}_k s_k$$

i norma je adimenzionalna.Jedinstveno rešenje problema (4) je dato **DFP** (Davidon, Fletcher, Powell) formulom

$$B_{k+1} = \left(I - \gamma_k y_k s_k^T\right) B_k \left(I - \gamma_k s_k y_k^T\right) + \gamma_k y_k y_k^T,$$

sa

$$\gamma_k = \frac{1}{y_k^T s_k}.$$

BFGS (Broyden, Fano, Godfab and Spedicato) postupak

Inverzni update dobijamo pomoću inverzne jednačine sečice i optimizacionog problema

$$\begin{aligned} &\min_H \|H - H_k\| \\ H y_k &= s_k, \quad H = H^T \end{aligned}$$

Uzimajući težinsku Frobenijusovu normu sa matricom $W = G_k^{-1}$,

$$G_k = \left[\int_0^1 \nabla^2 f(x_k + \tau \alpha_k p_k) d\tau\right]$$

rešavanjem problema minimizacije dobijamo

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= (I - \rho_k s_k y_k^T) H_k (I - \rho_k y_k s_k^T) + \rho_k s_k s_k^T, \\ \rho_k &= \frac{1}{y_k^T s_k}. \end{aligned}$$

Primenom Sherman-Morrison-Wodbury formule se dobija

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s_k s_k^T B_k^T}{s_k^T B_k s_k} + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k}.$$

Osobine BFGS i DFP postupaka

- superlinearna konvergencija

- Ako je H_k pozitivno definitno istu osobinu ima i H_{k+1}

- BFGS ima osobinu samokorekcije aproksimacije Hesijana (uz dobar line search) i zato je bolji u praksi

- izbor početne aproksimacije

Globalna konvergencija

Pretpostavke BFGS

(1) Funkcija cilja f je dva puta neprekidno diferencijabilna
(2) Nivo skup $\Omega = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$ je konveksan i postoje pozitivne konstane m i M tako da je na nivo skupu zadovoljeno

$$m \|z\|^2 \leq z^T G(x) z \leq M \|z\|^2.$$

TEOREMA 11. *Neka je B_0 SPD matrica i x_0 početna iteracija takod avaže pretpostavke BFGS. Tada niz generisan BFGS postupkom konvergira ka minimumu x_* funkcije f.*

Uz dodatnu pretpostavku da je matrica Hesijana Lipšic neprekidna u x_*,

$$\|G(x) - G(x_*)\| \leq L \|x - x_*\| \tag{5}$$

važi teorema o superlinearnoj konergenciji uz uslov

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k - x^*\| < \infty. \tag{6}$$

TEOREMA 12. *Neka su zadovoljeni uslovi prethodne teoreme i uslovi (5)-(6). Tada niz $\{x_k\}$ konvergira ka x_* superlineanro.*

2. Metod SR1

Ažuriranje aproksimacije Hesijana pomoću simetrične matrice ranga 1. Opšti oblik je

$$B_{k+1} = B_k + \sigma v v^T$$

gde je $\sigma = \pm 1$ a σ i v se biraju tako da važi jednačina sečeice $B_{k+1} s_k = y_k$. što implicira da je $v = \delta (y_k - B_k s_k)$ za neki skalar δ. Tako dobijamo

$$(y_k - B_k s_k) = \sigma \delta^2 \left[s_k^T (y_k - B_k s_k) \right] (y_k - B_k s_k)$$

što važi ako i samo ako je

$$\sigma = sgn \left[s_k^T (y_k - B_k s_k) \right], \quad \delta = \pm \left| s_k^T (y_k - B_k s_k) \right|^{-1/2}$$

te je nova aproksimacija Hesijana

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}.$$

Primenom SMW formule dobijamo

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k}.$$

Ne očuvava pozitivnu definitnost što je problem kod linijskog pretraživanja ali može biti prednost kod trust region metoda ako je u pitanju problem sa ograničenjima ili problem sa parcijabilno separabilnim funkcijama jer je tada pravi Hesijan indefinitan!

Razlikujemo tri slučaja

(1) Ako je $(y_k - B_k s_k)^T s_k \neq 0$ imamo jedinstvu korekciju
(2) Ako je $y_k = B_k s_k$ onda je jedina mogućnost da se očuva jednačina sečice $B_{k+1} = B_k$

(3) Ako je $y_k \neq B_k s_k$ i $(y_k - B_k s_k)^T s_k = 0$ onda ne postoji simetrična korekcija ranga 1 koja zadovoljava jednačinu sečice

Osobine SR1 formule

- Jednostavnim testom se obezbedjuje da ne dodje do singularne aproksimacije

$$\left| s_k^T (y_k - B_k s_k) \right| \geq r \|s_k\| \, \|y_k - B_k s_k\| \,. \tag{7}$$

- Matrice B_k obično jako dobro aproksimiraju Hesijan (bolje od BFGS)
- POstoje situacije kad je odsustvoi pozitivne definitnosti korisno

Konvergencija

Videćemo na primeru kvadratne funkcije da SR1 dobro aproksimira Hesijan.

Teorema 13. *Neka je $f : R^n \to R$ strogo konveksna kvadratna funkcija, $f(x) = b^T x + 1/2\, x^T A x$ gde je A pozitivno definitna simetrična matrica. Tada za svaku poČetnu aproksimaciju x_0 i svaku simetričnu matricu H_0 iteracije $\{x_k\}$ generisane SR1 metodom*

$$s_k = -H_k \nabla f_k, \quad x_{k+1} = x_k + s_k$$

konvergiraju ka minimumu u najviše n koraka ako je $(s_k - H_k y_k)^T y_k \neq 0$. Šta više, ako je odredjeno n iteracija i ako su pravci s_k medjusobno linearno nezavisni onda je $H_n = A^{-1}$.

Teorema 14. *Neka je $f \in C^2$ i nek aje Hesijan ograničen i Lipšic neprekidan u okolini tačke x^*. Neka je $\{x_k\}$ niz iteracija tako da je $x_k \to x^*$ za neko $x^* \in R^n$. Ako (7) važi za sve k za neko $r \in (0, 1)$ i ako su koraci s_k uniformno linearno nezavisni onda matrice B_k generisane SR1 metodom zadovoljavaju*

$$\lim_{k \to \infty} \left\| B_k - \nabla^2 f(x^*) \right\| = 0.$$

GLAVA 4

Postupak konjugovanih gradijenata

1. Linearni problem

Neka je dat sistem linearnih jednačina $Ax = b$, gde je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ simetrična pozitivno definitna matrica. Za razliku od iterativnih postupaka, postupak konjugovanih gradijenata i drugi slični postupci nemaju iterativnu matricu, iako nisu direktni postupci. Postupak konjugovanih gradijenata, za proizvoljno $x^0 \in \mathbb{R}^n$, daje vektore $\left\{x^k\right\}, k = 1, 2, \ldots, N$ i pri računanju u tačnoj aritmetici je $x^N = x = A^{-1}b$, za neko $N \leq n$. Zbog grešaka zaokruživanja x^N nije tačno rešenje, pa se postupak nastavlja, odnosno postaje iterativni postupak.

Ideja postupka konjugovanih gradijenata i šire klase, postupaka konjugovanih pravaca, se sastoji u sledećem. Izračunatoj aproksimaciji x^k se dodeli pravac traženja d_k, a zatim se izračunava $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$, gde je α_k rešenje jednodimenzionog problema minimizacije

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}} F\left(x^k + \alpha d_k\right), \tag{8}$$

za

$$F(x) = \frac{1}{2} x^\top A x - x^\top b, \quad x \in \mathbb{R}^n. \tag{9}$$

U daljem radu se pretpostavlja da je F uvek dato sa 9, a funkcija E sa

$$E(x) = F(x) + \frac{1}{2} b^\top A^{-1} b. \tag{10}$$

Lema 2. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ pozitivno definitna matrica i $b \in \mathbb{R}^n$. Tada je x minimum funkcije $E(y)$ ako i samo ako je x rešenje linearnog sistema jednačina*

$$\operatorname{grad} F(y) = Ay - b = 0.$$

Rešenje problema 8 dato je sledećom lemom.

Lema 3. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ pozitivno definitna matrica, $x, b \in \mathbb{R}^n$, $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ i $g = Ax - b$. Vektor $x + \alpha d$ minimizira funkciju $F(x + \alpha d)$ ako i samo ako je*

$$\alpha = \frac{-g^\top d}{d^\top A d}.$$

Postupak konjugovanih pravaca zahteva da pravci d_k po kojima se vrši minimizacija budu međusobno A-**konjugovani**.

Definicija 1. Ako je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ pozitivno definitna matrica, onda se za vektore $d_0, d_1, \ldots, d_N$ kaže da su međusobno A-konjugovani ako za sve $i, j \in \{0, 1, \ldots, N\}$ važi

$$d_i^\top A d_j = 0, \quad i \neq j.$$

Različitim izborom pravaca minimizacije d_k (koji zadovoljavaju prethodnu definiciju) dobijaju se različite postupci konjugovanih pravaca. Ako se izaberu pravci $d_i = e_{i+1}$, za $i = 0, 1, \ldots, n-1$, gde su e_i jedinični vektori, postupak konjugovanih pravaca je ekvivalentan sa Gausovim postupkom eliminacije. Kod postupka konjugovanih gradijenata pravci d_k se dobijaju pomoću gradijenata funkcije $F(x)$.

U lemi 2 je pokazano da je minimum funkcije $F(x)$ istovremeno i minimum funkcije $E(x)$. Kod postupka konjugovanih gradijenata (CG) pri određivanju vektora x^{k+1} se sprovodi k-dimenziona minimizacija. Vektor x^{k+1} se izračunava kao

$$x^{k+1} = x^k + u_0 r_0 + u_1 r_1 + \cdots + u_k r_k,$$

gde su r_i gradijenti funkcije $E\,(x)$, tj. $r_i = \operatorname{grad} E\,(x^i)$, $i = 0, 1, \ldots, k$, a brojevi $u_0, u_1, \ldots, u_k \in \mathbb{R}$ su određeni tako da je

$$F\left(x^k + u_0 r_0 + u_1 r_1 + \cdots + u_k r_k\right)$$

minimalno.

Osobina postupka konjugovanih gradijenata, da se rešenje nalazi u najviše n koraka u tačnoj aritmetici, je posledica linearne nezavisnosti A-konjugovanih gradijenata.

Lema 4. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ pozitivno definitna matrica i neka su vektori $d_0, d_1, \ldots, d_N \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, $N \leq n$, A-konjugovani. Tada su vektori $d_0, d_1, \ldots, d_N$ linearno nezavisni.*

Od datih n linearno nezavisnih vektora se Gram-Šmitovim postupkom ortogonalizacije može konstruisati skup međusobno A-konjugovanih vektora. Skalarni proizvod se definiše kao

$$(x, y)_A = x^\top A y.$$

Važi sledeća teorema, koja je uopštenje teoreme O Gram-Šmitovom postupku ortogonalizacije, sa skalarnim proizvodom $(\cdot, \cdot)_A$, pa je dokaz ovde izostavljen.

TEOREMA 1. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ pozitivno definitna matrica i neka su $p_0, p_1, \ldots, p_{N-1}$, $N \leq n$, linearno nezavisni vektori. Tada su vektori*

$$d_0 = p_0, \qquad d_k = p_k - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{p^\top A d_i}{d^\top A d_i} d_i, \quad k = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{11}$$

međusobno A-konjugovani i generišu isti prostor kao i vektori p_0, p_1, $\ldots$, p_{N-1}.

CG postupak se dobija ako se za vektore p_k biraju negativni gradijenti funkcije $F(x^k)$, tj. $p_k = -g_k = b - Ax^k$ i pravci minimizacije određuju prema 11, a skalari α_k pomoću leme 3. Pri tome, sukcesivno se računa $p_0, d_0, p_1, d_1, \ldots$. Da bi se postupak mogao sprovesti potrebno je dokazati da su vektori g_k, za $k = 0, 1, \ldots, n-1$ linearno nezavisni. Ukoliko je $g_N = 0$, za neko $N \leq n$, onda je rešenje sistema $Ax = b$ već dostignuto i računanje se prekida. Postupak konjugovanih gradijenata je dat sledećim CG algoritmom.

(1) korak: Izabere se proizvoljno $x^0 \in \mathbb{R}^n$ i izračuna $g_0 = Ax^0 - b$.
(2) korak: Ako je $g_0 = 0$, postavlja se $N = 0$ i računanje se prekida.
(3) korak: Ako je $g_0 \neq 0$, onda je $d_0 = -g_0$ i $k = 0$.
(4) korak:

$$\alpha_k = \frac{-g_k^\top d_k}{d_k^\top A d_k}, \qquad x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k, \qquad g_{k+1} = Ax^{k+1} - b.$$

(5) korak: Ako je $g_{k+1} = 0$, postavi se $N = k+1$ i računanje se prekida.
(6) korak: Računa se

$$\beta_k = \frac{g_k^\top A d_k}{d_k^\top A d_k}, \qquad d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k.$$

Stavi se $k = k+1$ i ide na korak 3.

Neka je sa span $\{d_0, d_1, \ldots, d_k\}$ označen linearni potprostor prostora $\mathbb{R}^n$ generisan vektorima $d_0, d_1, \ldots, d_k$, za proizvoljan prirodan broj k.

TEOREMA 2. *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ simetrična pozitivno definitna matrica i $b \in \mathbb{R}^n$. Za proizvoljno $x^0 \in \mathbb{R}^n$ Algoritam CG je dobro definisan. Pri tome su dobijeni vektori g_0, $g_1, \ldots, g_N$ linearno nezavisni,*

$$\operatorname{span}\{g_0, g_1, \ldots, g_k\} = \operatorname{span}\{g_0, Ag_0, \ldots, A^k g_0\}$$

i x^k za $k \in \{0, 1, \ldots, N\}$, $N \leq n$, minimizira funkciju $F(y)$ u afinom potprostoru $B_k = x^0 + \operatorname{span}\{g_0, g_1, \ldots, g_k\}$.

Kako su vektori $g_0, g_1, \ldots, g_k$, $k \leq n$ linearno nezavisni, na osnovu prethodne teoreme dobija se sledeće tvrđenje.

Posledica 1. *Neka su za proizvoljno $x^0 \in \mathbb{R}^n$ vektori x^k, $k = 1, 2, \ldots, n$ dobijeni po algoritmu CG. Tada je $x^N = x = A^{-1}b$ za neko $N \leq n$.*

Brzinu konvergenciju zapravo odredjuje broj različitih karakterističnih korena matrice A.

Teorema 3. *Ako A ima samo r različitih karakterističnih korena onda će se do rešenja dolazi u najviše r CG iteracija.*

Pored broja karakterističnih korena i njihov raspored utiče na brzinu konvergencije. KOristeći uslovni broj matrice $\kappa(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \lambda_1/\lambda_n$, za karakteristične korene $\lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_n$ važi ocena

$$\|x^k - x^*\| \leq \Big(\frac{\kappa(A)^1/2 - 1}{\kappa(A)^1/2 + 1}\Big)^{2k} \|x^0 - x^*\|.$$

Da bi se poboljšao raspored karakterističnih korena često se koristi **prekondicioniranje** uvodjenjem smene

$$\tilde{x} = Cx$$

za pogodno izabranu matricu C. Sada se posmatra gradijent nove kvadratne funkcije $E(\tilde{x})$ i rešava se sistem lineranih jednačina

$$(C^{-T} A C^{-1}) \tilde{x} = C^{-T} b,$$

pa konvegrencija zavisi od rasporeda karakterističnih korena matrice $C^{-T} A C^{-1}$.

2. Nelinearni konjugovani gradijenti

Fletcher-Reeves metod
Algoritam FR-CG
Za dato x_0, f_0, ∇f_0, postaviti $p_0 = -\nabla f_0$, $k = 0$.

(1) Ako je $\nabla f_k = 0$, stop.
(2) Izračunati α_k i postaviti $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$;
(3) Izračunati ∇f_{k+1}
(4)

$$\beta_{k+1} = \frac{\nabla f_{k+1}^T \nabla f_{k+1}}{\nabla f_k^T \nabla f_k}; \quad p_{k+1} = -\nabla f_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

(5) postavi $k = k + 1$

-Važna osobina - restart jako pomaže ($\beta_k = 0$) i važi tvrdjenje o $n-$kvadratnoj konvergenciji

Globalna konvergencija

Pretpostavke NCG

(1) Nivo skup je ograničen
(2) U nekoj okolini $\mathcal{N}$ funckija cilja je Lipšic neprekidno diferencijabilna

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(z)\| \leq L \|x - z\|, \quad x, z \in \mathcal{N}$$

Teorema 15. *Neka važe pretpostavke NCG. Neka je $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ gde je p_k opadajući pravac a α_k zadovoljava Wolfove uslove. Tada je*

$$\sum_{k=1}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 < \infty.$$

Teorema 16. *Neka važe uslovi prethodne teoreme pri čemu α_k zadovoljava Wolfove uslove sa $0 < c_1 < c_2 < 1/2$. Tada je*

$$\lim \inf_{k \to \infty} \|\nabla f_k\| = 0.$$

GLAVA 5

Primene Njutnovog metoda - sistemi velikih dimenzija

1. Netačni Njutnov metod

Umesto odredjivanja tačnog rešenja Njutnove jednačine uzima se približno rešenje tako da rezidualni vektor

$$r_k = \nabla^2 f_k p_k + \nabla f_k$$

bude dovoljno mali,

$$\|r_k\| \leq \eta_k \|\nabla f_k\| .$$

Teorema 17. *Neka je ∇f neprekidno diferencijabilno u okolini minimuma x_* i neka je $\nabla^2 f_*$ pozitivno definitno. Ako je p_k odredejeno takoda važi uslov za rezidualni vektor onda niz data sa $x_{k+1} = x_k + p_k$ konvergira ka x_* lokalno i linearno.*

Teorema 18. *Neka su zadovoljeni uslovi prethodne teoreme i neka niz x_k konverira ka x_*. Tada je za $\eta_k \to 0$ konvergencija superlinearna, a ako je $\eta_k = O(\|\nabla f_k\|)$ onda je konvergencija kvadratna.*

2. Line search Newton

Primenjujemo line searh algoritam koristeći Njutnov pravac $B_k = \nabla^2 f_k$ ili modifikovani Njutnov pravac dobijen pomoću

$$B_k = \nabla^2 f_k + E_k$$

gde je E_k dodatak kojim postižemo pozitivnu definitnost. Za α_k ponovo tražimo Wolfove uslove. Važi teorema.

Teorema 19. *Neka je f dva puta neprekidno diferencijabilno na otvorneom skupu i neka je x_0 takvo d aje nivo skup kompaktan. Ako važi osobina ograničene faktorizacije onda je*

$$\lim_{k\to\infty} \nabla f_k = 0.$$

3. Trust region Newton

Definišemo trust region problem pomoću pravog hesijana. Tako dobijamo trus region Njutn iteracije. Poenta je pokazati da radijus TR postaje neaktivan u krajnjoj fazi algoritma tj. svodi se na običnog Njutna sa svim njegovim dobrim osobinama.

TEOREMA 20. *Neka je f dva puta neprekidno diferencijalbilna funkcija. Neka $\{x_k\}$ konvergira ka x_* gde važe dovoljni uslovi drugog reda za za sve k dovoljno velike TR algoritam sa $B_k = \nabla^2 f_k$ uzima korake p_k koji postižu bar redukciju Košijeve tačke, $m_k(p_k) \leq m_k(p_k^c)$ i za koje važi*

$$\left\|p_k - p_k^N\right\| = o\left(\left\|p_k^N\right\|\right).$$

Tada trust region radijus postaje neaktivan za dovoljno veliko k.

Dog-leg i dvodimenziona minimizacija zadovoljaju uslove prethodne teoreme!

GLAVA 6

Metod najmanjih kvadrata

Posmatramo funkciju cilja

$$f(x) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m} r_j^2(x).$$

Funkcije r_j nazivamo **reziduali** i pretpostavljamo da su $r_j : R^n \to R$ glatke funkcije. Takodje pretpostavljamo da je $m \geq n$. Ova funkcija ima specijalne osobine. Ako je $J\left(x\right)$ oznaka za matricu parcijalnih izvoda preslikavanja r_j,

$$J(x) = \left[\frac{\partial r_j}{\partial x_i}\right],$$

tada je

$$\nabla f(x) = J(x)^T r(x)$$

i

$$\begin{aligned} \nabla^2 f(x) &= \sum_{j=1}^{m} \nabla r_j\left(x\right) \nabla r_j\left(x\right)^T + \sum_{j=1}^{m} r_j\left(x\right) \nabla^2 r_j\left(x\right) \\ &= J(x)^T J(x) + \sum_{j=1}^{m} r_j(x) \nabla^2 r_j(x). \end{aligned}$$

Ako imamo $J\left(x\right)$ odmah dobijamo i prvi sabirak u hesijanu, a taj sabirak je često važniji od drugog (ili je model skoro linearan ili su reziduali blizu rešenja jako mali).

1. Linearni najmanji kvadrati

Ako su reziduali linearne funkcije onda funkcija cilja ima oblik

$$f(x) = \frac{1}{2}\left\|J\,x + r\right\|_2^2,$$

gde je J fiksna matrica i $r(0) = 0$. Tada je

$$\nabla f(x) = J^T\left(Jx + r\right), \quad \nabla^2 f\left(x\right) = J^T J.$$

Ova funkcija cilja je konveksna, a iz uslova $\nabla f(x^*) = 0$ dobijamo **normalne jednačine**

$$J^T J x_* = -J^T r.$$

Rešenje tražimo metodama linearne algebre.

2. Nelinearni problem

2.1. Gaus-Njutnov metod. Metod je modifikacija Njutnovog metoda. Odbacujemo drugi član u izrazu za Hesijan i dobijamo pravac rešavanjem sistema

$$J_k^T J_k p_k^{GN} = -J_k^T r_k. \tag{12}$$

Prednosti - jednostavnije za izracunavanje, prvi član je često i najvažniji, i najvažnija osobina je da kad god J ima pun rang pavac $p_k^{GN} je$ opadajući pravac tj. pogodan za linijsko pretraživanje.Pored toga postoji sličnost izmedju Gaus-Njutnove jednačine (12) i normalnih jednačina kod linearnog problema tj. p^{GN} je rešenje linearnog problema

$$\min_p \|J_k p + f_k\|_2^2. \tag{13}$$

Upravo ova činjenica i motiviše Gaus-Njutnov pravac - umesto postavljanja kvadratnog modela za $f(x)$ iskoristimo aproksimaciju

$$r(x+p) \approx r(x) + J(x)p$$

i odredjujemo korak p tako što zamenjujemo linearno model funkcije r u funckiji cilja $f(x) = 0.5 \|r(x)\|_2^2$.

Ako u nekoj okolini nivo skupa

$$\mathcal{L} = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$$

važi osobina uniformnog punog ranga matrice $J(x)$ tj. ako postoji konstanta γ tako da je za sve x iz te okoline zadovoljeno

$$\|J(x) z\|_2 \geq \gamma \|z\|_2,$$

onda na osnovu Zoutendijkove teoreme imamo sledeće tvrdjenje.

TEOREMA 21. *Neka su sve rezidualne funcije r_j Lipšic neprekidno diferencijabilne u okolini nivo skupa i neka jakobijan $J(x)$ ima uniformno pun rang. Tada za iteracije $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k^{GN}$, gde α_k zadovoljava Wolfove uslove, važi*

$$\lim_{k\to\infty} J_k^T r_k = 0.$$

Ako $J(x_k)$ nem apun rang onda je matrica $J_k^T J_k$ singularna i prethodna teorema više ne važi .Brzina konvergencije zavisi od toga koliko je prvi sabirak $J^T J$ dominantan u hesijanu. Kako je

$$\begin{aligned} x_k + p_k^{GN} - x^* &= x_k - x^* - \left(J_k^T J_k\right)^{-1} \nabla f_k \\ &= \left(J_k^T J_k\right)^{-1} \left[J_k^T J_k \left(x_k - x^*\right) + \nabla f_* - \nabla f_k\right] \end{aligned}$$

ako sa $H(x)$ označimo drugi sabirak u hesijanu onda je

$$\begin{aligned} \nabla f_k - \nabla f_* &= \int_0^1 J^T J \left(x^* + t\left(x_k - x^*\right)\right)\left(x_k - x^*\right) dt \\ &\quad + \int_0^1 H\left(x^* + t\left(x_k - x^*\right)\right)\left(x_k - x^*\right) dt. \end{aligned}$$

Majorizacijom dobijamo

$$\left\|x_k + p_k^{GN} - x^*\right\| \approx \left\|\left[J^T J\left(x^*\right)\right]^{-1} H\left(x^*\right)\right\| \left\|x_k - x^*\right\| + \mathcal{O}\left(\left\|x_k - x^*\right\|^2\right).$$

Dakle, kada je $H(x^*) = 0$ onda je konvergencija kvadratna, a ako je $\left\|\left[J^T J\left(x^*\right)\right]^{-1} H\left(x^*\right)\right\| < 1$ onda postupka konvergira i brzina zavisi od $\left\|\left[J^T J\left(x^*\right)\right]^{-1} H\left(x^*\right)\right\|$.

2.2. Levenberg-Marquardt metod. Specijalan slučaj trust region metoda gde je svaki potproblem dat sa kavdratnom funckijom

$$m_k(p) = \frac{1}{2}\left\|J_k p + r_k\right\|^2, \quad \|p\| \leq \Delta_k.$$

TEOREMA 22. *Neka je $\eta \in (0, 1/4)$ u TR algoritmu i neka su funkcije r_i dva puta neprekidno diferencijabilne u okolini nivo skupa. Neka je za svako k približno rešanje TR problema p_k takvo da važi nejednakost*

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \left\|J_k^T r_k\right\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|J_k r_k\|}{\|J_k^T J_k\|}\right)$$

za neku konstantu $c_1 > 0$. Tada je

$$\lim_{k\to\infty} \nabla f_k = \lim_{k\to\infty} J_k^T r_k = 0.$$

Neposredna posledica karakterizacije tačnog rešenja TR potproblema je sledeća teorema.

TEOREMA 23. *Vektor p^{LM} je rešenje problema*

$$\min_p \|Jp + r\|^2, \quad \|p\| \leq \Delta$$

za neko $\Delta > 0$ *ako i samo ako postoji skalar* $\lambda \geq 0$ *tako da je*

$$(J^T J + \lambda I)p^{LM} = -J^T r,$$
$$\lambda \left(\Delta - \left\| p^{LM} \right\| \right) = 0.$$

Problemi sa velikim rezidualom

Kod ovih problema se GN i LM obično loše ponašaju u smislu spore konvergencije - asimptotiska konvergencija je najčešće linearna. Zbog toga se primenjuju hibridni algoritmi - GN ili LM u kombinaciji sa NJutnovim ili kvazi-Njutnovim metodom.

GLAVA 7

Rešavanje sistema nelinearnih jednačina

Problem rešavanja sistema nelinearnih jednačina

$$r(x) = 0$$

gde je $r : R^n \to R^n$ neprekidno diferencijabilna funkcija, je usko povezan sa optimizacijom bez ograničenja. Ovom problemu se na prirodan način pridružuje funkcija cilja

$$f(x) = \frac{1}{2}\|r(x)\|^2.$$

Ako je sada broj promenljivih jednak broju jednačina ne traži se x^* koje minimizira funkciju f u smislu najmanjeih kvadrata već minimum za koji je $f(x^*) = 0$.

Koristićemo oznaku $J(x) = r'(x)$ za jakobijan preslikavanja r..

1. Lokalni algoritmi

Njutnov metod

Metod je zasnovan na linearnom modelu fukcije r i ima oblik

$$J(x_k)\, s_k = -r(x_k), \quad x_{k+1} = x_k + s_k.$$

Ako je x_0 dovoljno blizu tačnog rešenja x^*, jakobijan u rešenju $J(x^*)$ regularan i ako je $J(x)$ Lipšic neprekidno preslikavanje u okolini rešenja metod je kvadratno konvergentan. Mane metoda su potreba za izračunavanjem jakobijana i rešavanjem sistema linearnih jednačina u svakoj iteraciji.

Teorema 4. *Neka je r neprekidno diferencijabilno na otvorenom konveksnom skupu $D \subset R^n$ i neka je $x^* \in D$ nedegenerativno rešenje sistema $r(x) = 0$ a $\{x^k\}$ niz generisan Njutnovim postupkom. Kada je x_k dovoljno blizu x^* onda je*

$$\|x_k - x^*\| = o(\|x_k - x^*\|).$$

Ako je r Lipšic neprekidno diferencijabilno u okolini x^* i x_k dovoljno blizu x^* onda je

$$\|x_k - x^*\| = \mathcal{O}(\|x_k - x^*\|).$$

Netačni Njutnov metod

Otklanja potrebu za tačnim rešavanjem sistema linearnih jednačina u svakoj iteraciji jer dozvoljava približno rešavanje uz kontrolu greške datu nejednakošću

$$\|r_k + J_k p_k\| \leq \eta_k \|r_k\|,$$

za $\eta_k \in [0, \eta]$. Važi sledeća teorema o lokalnoj konvergenciji.

Teorema 5. *Neka je r neprekidno diferencijabilno na otvorenom konveksnom skupu $D \subset R^n$ i neka je x^* nedegenerativno rešenje sistema $r(x) = 0$ a $\{x_k\}$ niz generisan netačnim Njutnovim metodom. Ako je x_k dovoljno blizu x^* onda važe sledeća tvrdjenja.*
Ako je η dovoljno malo ond aje konevregencija q-linearna.
Ako $\eta_k \to 0$ onda je konvergencija q-superlinearna.
Ako je $\eta_k = \mathcal{O}(\|r_k\|)$ i J je Lipšic neprekidno na D ond aje konvergencija kvadratna.

Brojdenov metod

Kvazi-Njutnov metod zasnovan na jednačini sečice. Ako je

$$y_k = r_{k+1} - r_k, \quad s_k = x_{k+1} - x_k$$

onda je jednačina sečice

$$B_{k+1} s_k = y_k.$$

Brojdenova matrica se ažurira na osnovu jednačine sečice i principa njamanje promene (least change secant update) i dobija se kao

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)\, s_k^T}{s_k^T s_k}.$$

Pravac p_k pdredjujemo iz kvazi-Njutnove jednačine

$$B_k p_k = -r_k.$$

Brojdeno metod je lokalno superlinarno konvergentan ako su početne aproksimacije x_0 i B_0 dobro izabrane - važi teorema dve okoline.

Teorema 6. *Neka važe uslovi teoreme o netačnom Njutnovom metodu. Tada postoje pozitivne konstante ε i δ tako da ako početna aporksimacija x_0 i početna aproksimacija jakobijana B_0 zadovoljavaju uslove*

$$\|x_0 - x^*\| \leq \varepsilon, \quad \|B_0 - J(x^*)\| \leq \delta$$

niz $\{x_k\}$ generisan Brojdenovim postupkom konvergira superlinearno ka x^*.

2. Globalni algoritmi.

Za globalizaciju lokalnih metoda koristimo tehnike optimizacije bez ograničenja - linijsko pretraživanje i trust region sa funkcijom cilja

$$f(x) = \frac{1}{2}\|r(x)\|^2.$$

Ako primenjujemo **linijsko pretraživanje** onda p_k mora biti opadajući pravac tj.

$$\cos\theta_k = \frac{-p_k^T \nabla f_k}{\|p_k\| \|\nabla f_k\|} > 0,$$

a korak α_k odredjujemo tako da se zadovoloje Wolfovi uslovi, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k$.

Ako je $J(x)$ neprekidno diferencijabilno u okolini D nivo skupa onda važi Zoutendijkova teorema.

Njutnov pravac je opadajući pravac ako je jakobijan regularan jer važi

$$\nabla f_k^T p_k^N = -\left(J_k^T r_k\right)^T J_k^{-1} r_k < 0,$$

ako je $r_k \neq 0$. Takodje je

$$\cos\theta_k = \frac{-p_k^T \nabla f_k}{\|p_k\| \|\nabla f_k\|} = \frac{\|r_k\|^2}{\left\|J_k^{-1} r_k\right\| \|J_k^T r_k\|} \geq \frac{1}{\|J_k^T\| \left\|J_k^{-1}\right\|} = \frac{1}{k(J_k)}.$$

Za primenu Zoutendijkove teoreme treba da obezbedimo

$$\cos\theta_k \geq \delta, \quad \delta \in (0,1). \tag{14}$$

Ako je pak jakobijan singularan onda posmatramo modifikovani Njutnov pravac

$$p_k = -\left(J_k^T J_k + \tau_k I\right)^{-1} J_k^T r_k$$

gde τ_k biramo tako da uslov (14) bude zadovoljen.

Ako je p_k netačni Njutnov pravac onda je

$$\|r + Jp\|^2 \leq \eta_k^2 \|r\|^2,$$

pa je

$$2p^T J^T r + \|r\|^2 + \|Jp\|^2 \leq \eta^2 \|r\|^2$$

što implicira

$$p^T \nabla r = p^T J^T r \leq \left[\left(\eta^2 - 1\right)/2\right] \|r\|^2.$$

Takodje je

$$\|p\| \leq \left\|J^{-1}\right\| [\|r + Jp\| + \|r\|] \leq \left\|J^{-1}\right\| (\eta + 1) \|r\|$$

i

$$\|\nabla r\| = \left\|J^T r\right\| \leq \|J\| \|r\|.$$

Kombinujući ove nejednakosti dobijamo

$$\cos\theta_k = -\frac{p^T \nabla r}{\|p\| \, \|\nabla r\|} \geq \frac{1-\eta^2}{2\,\|J\| \, \|J^{-1}\| \, (1+\eta)} \geq \frac{1-\eta}{2k\,(J)},$$

te zaključujemo da netačni pravac ne ugrožava globalnu konvergenciju.

Konvergencija Njutnovog ili modifikovanog Njutnovog metoda sa linijskim pretraživanjem (LSN) je data u sledećoj teoremi.

Teorema 7. *Neka LSN algoritam daje niz $\{x_k\}$ koji konvergira ka x^* tako da je $r\,(x^*) = 0$ i $J\,(x^*)$ je nesingularno. Neka postoji otvorena okolina x^* tako da su fukcije $r_i\,(x)$ dva puta diferencijabilne i da su $\|\nabla^2 r_i\,(x)\|$, $i = 1, \ldots, n$ ograničeni na D. Ako je jedinični korak $\alpha_k = 1$ prihvaćen svaki puta kada su zadovoljeni Wolfovi uslovi sa $c_1 < 1/2$ onda je konvergencija q-kvadaratna.*

Analogno se prenose rezultati za trust region algoritam.

3. Homotopija

Glavni nedostatak Njutnovog metoda je uslov da Jakobijan bude regularan na oblasti koja nas zanima da bi izbegli lokalne minimume funkcije f. Metode produženja (homotopije) u "teškim" slučajevima pokazuju bolj eosobine od Njutnovog metoda jer se eksplicitno zasnivaju na $r\,(x) = 0$. Postupka se sastoji odabiru početnog sistema koji je lak za rešavanje i postepenoj transformaciji ka originalnom sistemu $r\,(x) = 0$. Rešavanjem niza sistema od rešenja početnog sistema stižemo do rešenja originalnog problema. Homotopija $H\,(x, \lambda)$ se definiše kap

$$H\,(x, \lambda) = \lambda r\,(x) + (1-\lambda)\,(x-a)\,,$$

gde je λ parametar a $a \in R^n$ fiksni vektor. Kada je $\lambda = 0$ početni problem je očigledno trivijalan $H\,(x, 0) = x - a$, a za $\lambda = 1$ dobijamo $H\,(x, 1) = r\,(x)$. Postupak se sastoji u sledećem. Postavimo $\lambda = 0$ i rešimo početni problem $x = a$. Zatim povećamo λ i rešimo naredni problem $H\,(x, \lambda) = 0$ uzimajući rešenje prethodnog kao startnu aproksimaciju. Konačna vrednost x koja odgovara $\lambda = 1$ je rešenje originalnog problema. Ovaj pristup dobro funkcioniše ako postoji jedinstveno rešenje x sistema $H\,(x, \lambda) = 0$ za svako $\lambda \in [0, 1]$. Ovaj pristup funkcioniše ako trajektorija (nula-kriva) (x, λ) na kojoj je $H\,(x, \lambda) = 0$ nema povratnih tačaka.

Neka je s nezavisna promenljiva koja meri dužinu luka na nula krivoj i neka je $x = x\,(s)$, $\lambda = \lambda\,(s)$ uz uslov $(x\,(0), \lambda\,(0)) = (a, 0)$. Polazeći od jednačine

$$H\,(x\,(s), \lambda\,(s)) = 0, \quad s \geq 0$$

totalni diferencijal je

$$\frac{\partial}{\partial x}H(x,\lambda)\,x' + \frac{\partial}{\partial \lambda}H(x,\lambda)\,\lambda' = 0, \quad (x',\lambda') = \left(\frac{dx}{ds},\frac{d\lambda}{ds}\right). \tag{15}$$

Vektor (x',λ') je tangentni vektor na nula krivu i nalazi se u nula prostoru $n \times (n+1)$ matrice

$$\left[\begin{array}{cc} \frac{\partial}{\partial x}H(x,\lambda) & \frac{\partial}{\partial \lambda}H(x,\lambda) \end{array}\right]. \tag{16}$$

Ako je rang te matrice n onda je nula prostor dimenzije 1 pa da bi potpuno definisali tangentni vektor treba nam jos jedna jednačina

$$\|x'(s)\|^2 + \|\lambda'(s)\|^2 = 1, \quad s \in R.$$

Smer tangentnog vektora biramo tako da napredujemo duž nula krive.

TEOREMA 8. *Neka je r dva puta diferencijabilna funkcija. Tada za skoro sve vektore $a \in R^n$ postoji nula-putanja iz $(0,a)$ duž koje matrica (16) ima pun rang. Ako je ta putanja ograničena za $\lambda \in [0,1)$ ond apostoji tačka nagomilavanja $(x^*,1)$ tako da je $r(x^*) = 0$. Ako je jos jakobijan $J(x^*)$ regularan ond anula putanja od $(a,0)$ do $(x^*,1)$ ima konačnu dužinu luka.*