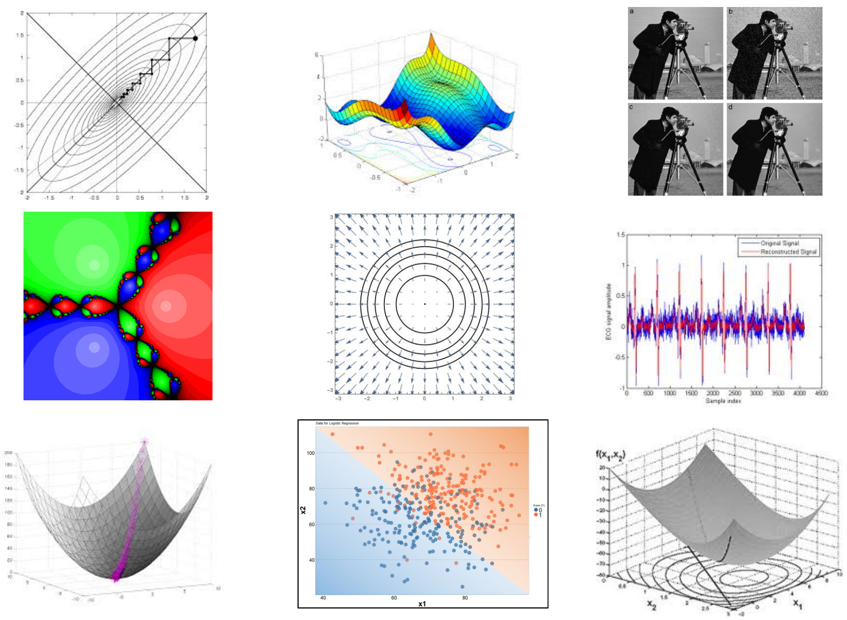
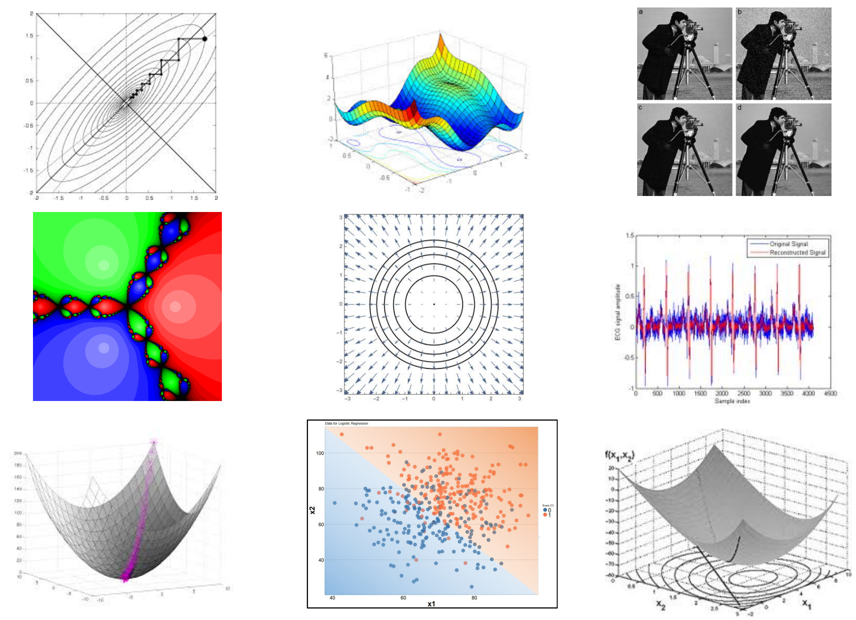


Metódy voľnej optimalizácie - letný semester 2018

M. Trnovská, KAMŠ, FMFI UK



Kvázinewtonovské metódy

Kvázinewtonovské metódy

Efektívnosť Newtonovej metódy

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

spočíva v informácií o krivosti funkcie $f(x)$, ktorá je ukrytá v Hessovej matici.

V praxi je často výpočet Hessovej matice časovo náročný, niekedy sa nedá počítať analyticky ale len numericky.

To viedlo k metódam, ktoré využívjú len funkčné hodnoty a gradienty funkcie $f(x)$ a úzko súvisia s Newtonovou metódou.

Kvázinewtonovské metódy generujú **postupnosť aproximácí Hessovej matice** a ich konvergencia je uspokojivo rýchla.

Kvázinewtonovské metódy

Klasická Newtonova metóda pre minimalizáciu funkcie n premenných je odvodená z jednorozmernej Newtonovej metódy

$$x^{k+1} = x^k - {f'_k}^{-1} f''_k$$

(kvadratická interpolácia minima - prípad jedného uzla, daná je funkčná hodnota, hodnota prvej a druhej derivácie).

V prípade kvadratickej interpolácie s dvoma uzlami (dané funkčné hodnoty a hodnoty derivácií) sme získali iteračný predpis v tvare

$$x^{k+1} = x^k - \left[\frac{f'_k - f'_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}\right]^{-1} f'_k = x_k - h_k^{-1} f'_k,$$

čo indikuje, že veličina h_k slúži ako aproximácia druhej derivácie f''_k.

Kvázinewtonovské metódy

Newtonova metóda pre minimalizáciu funkcie n premenných bola odvodená z kvadratickej aproximácie funkcie $f(x)$ Taylorovym polynómom II. rádu.

Formálne má iteračná formula tvar:

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

Nedostatky:
- treba počítať Hessovu maticu 2. parciálnych derivácí; - treba triešiť sústavu n lineárnych rovníc

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

Základná myšlienka kvázinewtonovských metód: **postupná aproximácia inverznej Hessovej matice.**

Kvázinewtonovské metódy

Analýza kvadratického modelu

$$Q(x) = \frac{1}{2}x^T G x + h^T x, \quad g(x) = Gx + h$$

Zrejme platí

$$(g_{k+1} - g_k) = G(x^{k+1} - x^k), \quad (x^{k+1} - x^k) = G^{-1}(g_{k+1} - g_k).$$

Označme

$$p_k = x^{k+1} - x^k, \quad y_k = g_{k+1} - g_k.$$

Kvázinewtonovské podmienky:

$$y_k = Gp_k, \quad p_k = G^{-1}y_k.$$

Kvázinewtonovské metódy

Aproximácia inverznej Hessovej matice v bode x^k:

$$H_k \approx \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}$$

Problém:

Ako nájsť novú aproximáciu Hessovej matice v bode x^{k+1} a

1. využiť pritom novú informáciu g_{k+1} - ale
2. zachovať informáciu obsiahnutú v H_k?

Kvázinewtonovské metódy

Riešenie:

- Vyžaduje sa splnenie kvázinewtonovskej podmienky

$$H_{k+1} y_k = p_k.$$

- Vyžaduje a splnenie podmienky

$$H_{k+1} r = H_k r$$

pre všetky vektory r z nejakého podpriestoru, ktorý neobsahuje vektor y_k.

Maticu H_{k+1} reprezentujeme v tvare aditívnej korekcie:

$$H_{k+1} = H_k + \triangle H_k.$$

Kvázinewtonovské metódy

Korekčná matica $\triangle H_k$ sa konštruuje tak aby platilo:

-$\triangle H_k y_k = p_k - H_k y_k$ - kvázinewtonovská podmienka

-$\triangle H_k r = 0$ pre všetky vektory r z nejakého podpriestoru, ktorý neobsahuje vektor y_k.

Tieto podmienky definujú prechod $H_k \rightarrow H_{k+1}$. Samotné matice H_k musia mať špecifické vlastnosti:
- symetria a kladná definitnosť
- jednoduchosť korekčnej matice $\triangle H_k$ - hodnosť 1 alebo 2.

Kvázinewtonovské metódy

$(k+1)$-vá iterácia kvázinewtonovskej metódy (KNM):

Vstup:	Štartovací bod iteračného procesu $x^k \in \mathbb{R}^n$.
	Gradient $g_k = \nabla f(x^k)$.
	Symetrická, kladne definitná matica H_k
1. krok	Vypočítame spádový smer $s_k = -H_k g_k$.
2. krok	V smere s_k vypočítame optimálny krok λ_k.
3. krok	Vypočítame nový bod $x^{k+1} = x^k + \lambda_k s_k$.
4. krok	Vypočítame gradient g_{k+1} a vektory
	$y_k = g_{k+1} - g_k$, $p_k = x^{k+1} - x^k$.
5. krok	Pomocou vektorov p_k, y_k a matice H_k
	skonštruujeme korekčnú maticu $\triangle H_k$
6. krok	Vypočítame novú maticu
	$H_{k+1} = H_k + \triangle H_k$.

Kvázinewtonovské metódy

Vlastnosti:

a) smer s_k definovaný vzťahom $s_k = -H_k g_k$ je spádový, t. j. platí

$$g_k^T s_k < 0;$$

b) pre vektory p_k, y_k platí

$$p_k^T y_k > 0.$$

Kvázinewtonovské metódy

Základné kvázinewtonovské formule

DFP

$$\triangle H_k = \frac{p_k p_k^T}{p_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k}$$

BFGS

$$\triangle H_k = \left(1 + \frac{y_k^T H_k y_k}{p_k^T y_k}\right) \frac{p_k p_k^T}{p_k^T y_k} - \frac{H_k y_k p_k^T + p_k y_k^T H_k}{p_k^T y_k}$$

SR1

$$\triangle H_k = \frac{(p_k - H_k y_k)(p_k - H_k y_k)^T}{y_k^T (p_k - H_k y_k)}$$

Kvázinewtonovské metódy

DFP kvázinewtonovská formula

Korekčná matica má tvar:

$$\triangle H_k = \frac{p_k p_k^T}{p_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k}$$

Veta 1:

Nech matica H_k je symetrická a kladne definitná. Potom aj matica H_{k+1} definovaná vzťahom

$$H_{k+1} = H_k + \frac{p_k p_k^T}{p_k^T y_k} - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k}$$

je symetrická a kladne definitná. Teda ak začiatočná matica H_0 je symetrická, kladne definitná, tak DFP-metóda generuje symetrické, kladne definitné matice H_k.

Kvázinewtonovské metódy

Veta 2:

DFP metóda definovaná iteračnou schémou (KNM) a vzťahom (DFP), aplikovaná na kvadratickú funkciu $Q(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + h^T x$, s kladne definitnou maticou G, má nasledovné vlastnosti:

a) Pre $0 \leq j < k$ platí

$$H_k y_j = p_j,$$

b) Pre $0 \leq j < k$ platí

$$g_k^T p_j = 0,$$

t. j. g_k je ortogonálny ku všetkým použitým smerom p_j.

c) Pre $0 \leq i < j \leq k$ platí

$$p_i^T G p_j = 0,$$

t. j. smery p_j sú G-združené.

Kvázinewtonovské metódy

BFGS kvázinewtonovská formula

Ekvivlentná formulácia kvázinewtonovskej podmienky

$$B_{k+1}p_k = y_k, \quad B_k \approx \nabla^2 f(x_k).$$

Analogicky ako v prípade DFP formule získame iteračný predpis pre aproximáciu Hessovej matice

$$B_{k+1} = B_k + \triangle B_k = B_k + \frac{y_k y_k^T}{p_k^T y_k} - \frac{B_k p_k p_k^T B_k}{p_k^T B_k p_k}$$

Matice B_k by sme tiež mohli použiť v algoritme, a však smer by sme museli získať riešením systému rovníc $B_k s_k = -g_k$.

Invertovaním predpisu pre B_{k+1} získame prdpis pre H_{k+1}, ktorý bude odliššný od DFP formule.

Kvázinewtonovské metódy

Aplikovaním Woodburyho formule pre invertovanie:

$$(A - US^{-1}V^T)^{-1} = A^{-1} + A^{-1}U(S - V^TA^{-1}U)^{-1}V^TA^{-1}$$

na blokový tvar formule

$$B_{k+1} = B_k - \left(B_kp_k \mid y_k\right)\begin{pmatrix} \frac{1}{p_k^TB_kp_k} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{p_k^Ty_k} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_k^TB_k \\ y_k^T \end{pmatrix}$$

dostávame BFGS formulu (Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno):

$$H_{k+1} = H_k + \left(1 + \frac{y_k^TH_ky_k}{p_k^Ty_k}\right)\frac{p_kp_k^T}{p_k^Ty_k} - \frac{H_ky_kp_k^T + p_ky_k^TH_k}{p_k^Ty_k}.$$

Kvázinewtonovské metódy

SR1 kvázinewtonovská formula

- Symmetric Rank 1 - kvázinewtonovská formula hodnosti 1

- Korekčná matica sa hľadá v tvare

$$\triangle H_k = \alpha u u^T.$$

- Ak označíme $r_k = p_k - H_k y_k$, tak kvázinewtonovskú formulu možno napísať v tvare

$$\triangle H_k y_k = \alpha u u^T y_k = r_k.$$

- Prirodzenou voľbou je

$$u = r_k, \quad \alpha = \frac{1}{r_k^T y^k}$$

Kvázinewtonovské metódy

Kvázinewtonovská SR1 formula:

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

Komplemntárna kvázinewtonovská formula:

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

Veta 3:

Majme dvojicu (SR1) a (kSR1) komplementárnych kvázinewtonovských SR1-formúl, kde $B_k^{-1} = H_k$. Potom platí

$$B_{k+1}^{-1} = H_{k+1}.$$

Kvázinewtonovské metódy

Veta 4:

Nech $Q(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + h^T x,\ G \succ 0$. Dané sú lineárne nezávislé smery $p_0, p_1, \ldots, p_{n-1} \in \mathbb{R}^n$. Označme

$$\begin{array}{ll} y_k = Gp_k, & k = 0, 1, \ldots, n-1, \\ r_k = p_k - H_k y_k, & k = 0, 1, \ldots, n-1, \\ H_{k+1} = H_k + \frac{1}{y_k^T r_k} r_k r_k^T, & k = 0, 1, \ldots, n-1, \end{array}$$

,

pričom H_0 je ľuvovoľná symetrická matica a $y_k^T r_k \neq 0,\ \forall k$. Potom

$$H_n = G^{-1}.$$