

Calcul Numeric

Curs 11

A decorative horizontal band consisting of multiple overlapping, wavy lines in shades of orange and light brown, creating a sense of motion and depth across the middle of the slide.

Conf. dr. Anca Ignat

Conf. dr. Andreea Arusoaie

May 9, 2026

Optimizare numerică

Probleme de minimizare

$$\min \{ f(x) ; x \in D \}, \quad D \subseteq \mathbb{R}^n, \quad f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$$

O problemă de maximizare se poate reduce la una de minimizare astfel:

$$\max \{ f(x) ; x \in D \} = - \min \{ -f(x) ; x \in D \}.$$

Tipuri de probleme de optimizare

- liniară sau neliniară - funcția f este liniară sau neliniară
- pătratică - funcția f este pătratică
- convexă - funcția f este convexă
- fără restricții - $D \subseteq \mathbb{R}^n$
- cu restricții - $D = \{x \in \mathbb{R}^n ; g(x) \leq 0\}$
- continuă - x ia valori reale, $D \subseteq \mathbb{R}^n$
- discretă - x ia valori discrete, D mulțime de valori discrete
- în numere întregi - $D \subseteq \mathbb{Z}^n$
- mixtă - unele componente ale vectorului x sunt discrete și celelalte sunt continui
- ...

Optimizare - Definiții

Considerăm problema de minimizare fără restricții:

$$\min \{ f(x) ; x \in \mathbb{R}^n \} \quad f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$$

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numește **punct de minim global** pentru funcția f dacă $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$.

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numește **punct de minim local** pentru funcția f dacă există o vecinătate V a punctului x^* astfel încât $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in V$.

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ se numește **punct de minim strict local** pentru funcția f dacă există o vecinătate V a punctului x^* astfel încât $f(x^*) < f(x)$, $\forall x \in V, x \neq x^*$.

$$V = S(x^*, r) = \{ x \in \mathbb{R}^n ; \|x - x^*\| \leq r \}$$

Optimizare - Definiții

Dacă funcția $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$, se numește **gradient** al funcției f în punctul x , vectorul:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \frac{\partial f}{\partial x_2}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^T$$

Dacă funcția $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, se numește **matrice Hessiană** a funcției f în punctul x , matricea:

$$H_f(x) = \nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{i,j=1,\dots,n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

Matricea Hessiană

$$H_f(x) = \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) \\ & & \vdots & \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{pmatrix}$$

Dezvoltare în serie Taylor de ordinul 1

$$f \in C^2(\mathbb{R}^n) \quad , \quad a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

$$f(x) = f(a) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(a)(x_i - a_i) + R(\|x - a\|^2)$$

$$= f(a) + \nabla f(a)^T(x - a) + R(\|x - a\|^2)$$

Dezvoltare în serie Taylor de ordinul al 2-lea

$$f \in C^2(\mathbb{R}^n) \quad , \quad a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

$$\begin{aligned} f(x) &= f(a) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(a)(x_i - a_i) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a)(x_i - a_i)(x_j - a_j) + \bar{R}(\|x - a\|^3) \\ &= f(a) + \nabla f(a)^T(x - a) + \frac{1}{2}(x - a)^T H_f(a)(x - a) + \bar{R}(\|x - a\|^3) \end{aligned}$$

Optimizare - condiții necesare de optim de ordinul 1

Teorema 1

Fie $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ și $x^* \in \mathbb{R}^n$ un punct de minim local pentru funcția f . Atunci $\nabla f(x^*) = 0$.

Un punct $x^* \in \mathbb{R}^n$ pentru care $\nabla f(x^*) = 0$ se numește **punct staționar/critic** pentru funcția f .

Teorema de mai sus spune că orice punct de minim local pentru funcția f trebuie să fie punct staționar. Punctele de minim local pot fi căutate printre soluțiile sistemului nelinier de ecuații $\nabla f(x) = 0$.

Optimizare - condiții necesare de optim de ordinul al 2-lea

Teorema 2

Fie $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ și $x^* \in \mathbb{R}^n$ un punct de minim local pentru funcția f . Atunci $\nabla f(x^*) = 0$ și matricea Hessiană $H_f(x^*)$ este pozitiv semidefinită.

O matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se numește **pozitiv definită** dacă:

$$(Ax, x)_{\mathbb{R}^n} > 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \quad , \quad x \neq 0$$

O matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se numește **pozitiv semidefinită** dacă:

$$(Ax, x)_{\mathbb{R}^n} \geq 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Optimizare - condiții suficiente de optim de ordinul al 2-lea

Teorema 3

Fie $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$, $x^* \in \mathbb{R}^n$ un punct staționar, $\nabla f(x^*) = 0$ pentru care matricea Hessiană $H_f(x^*)$ este pozitiv definită. Atunci x^* este punct de minim strict local pentru funcția f .

Optimizare - funcții convexe

O funcție $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ se numește **funcție convexă** dacă:

$$f(ax_1 + (1-a)x_2) \leq af(x_1) + (1-a)f(x_2), \quad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n, \quad \forall a \in [0, 1]$$

Teorema 4

Dacă funcția $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ este convexă atunci orice punct de minim local este punct de minim global. Dacă, în plus, $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ atunci orice punct staționar ($\nabla f(x^*) = 0$) este punct de minim global.

Optimizare - Metode de descreștere

Se numește **direcție de descreștere** a funcției f în punctul x , un vector $d \in \mathbb{R}^n$ pentru care:

$$f(x + \alpha d) \leq f(x) , \quad \forall \alpha \in [0, \bar{\alpha}).$$

Teorema 5

Fie $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$. Un vector $d \in \mathbb{R}^n$ este direcție de descreștere pentru funcția f în punctul x dacă și numai dacă:

$$\nabla f(x)^T d = (d, \nabla f(x))_{\mathbb{R}^n} < 0.$$

Algoritm de optimizare

Metodă de descreștere

1. alege $x \in \mathbb{R}^n$
2. do
 - ▶ găsește o direcție de descreștere d a funcției f în x ;
 - ▶ găsește $\tilde{\alpha} > 0$ astfel ca:

$$f(x + \tilde{\alpha} d) = \min \{f(x + \alpha d) ; \alpha \in [0, \tilde{\alpha}]\}$$

(ajustarea pasului -line search)

- ▶ $x = x + \tilde{\alpha} d$

while (nu am găsit soluția);

Ajustarea pasului (line search)

Pentru găsirea lui \tilde{a} , avem de rezolvat o problemă de minimizare unidimensională:

$$\min \{ g(a) ; a \in [b, c] \}. \quad (1)$$

Pentru rezolvarea acestei probleme, de obicei, se folosesc algoritmi care aproximează soluția ecuației neliniare $g'(a) = 0$. Se construiesc șiruri de vectori (a_k) , care, în anumite cazuri, converg la soluția problemei $g'(a) = 0$. Pentru ca soluția găsită să fie și soluția problemei (1), este necesar ca $g''(a^*) \geq 0$.

Metoda Newton

Fie a_k aproximarea curentă soluției problemei de minimizare (1). Folosim dezvoltarea în serie Taylor a funcției g :

$$g(a) = g(a_k) + g'(a_k)(a - a_k) + \frac{1}{2!}g''(a_k)(a - a_k)^2 + \frac{1}{3!}g'''(a_k)(a - a_k)^3.$$

Fie funcția q definită de:

$$q(a) = g(a_k) + g'(a_k)(a - a_k) + \frac{1}{2}g''(a_k)(a - a_k)^2. \quad (2)$$

Metoda Newton

Pentru valori ale lui a în apropiere lui a_k putem presupune că funcția q aproximează funcția g , $g(a) \approx q(a)$. Pentru a afla următorul element din șir, a_{k+1} , vom minimiza funcția q (în locul funcției g).

Calculăm următorul element din șir, a_{k+1} , ca soluție a problemei de minimizare:

$$q(a_{k+1}) = \min \{ q(a) ; a \in [b, c] \}.$$

Funcția q este un polinom de grad 2 în necunoscuta a , de unde vom obține următoarea formulă pentru a_{k+1} :

$$a_{k+1} = a_k - \frac{g'(a_k)}{g''(a_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Primul element al șirului, a_0 se alege la întâmplare.

Metoda secantei

Dacă în relația (2), se face următoarea aproximare:

$$g''(a_k) \approx \frac{g'(a_k) - g'(a_{k-1})}{a_k - a_{k-1}}$$

obținem următoarea metodă de aproximare, numită **metoda secantei**:

$$a_{k+1} = a_k - g'(a_k) \frac{a_k - a_{k-1}}{g'(a_k) - g'(a_{k-1})}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Pentru a construi șirul a_k , trebuie precizate primele două elemente din șir, a_0 și a_1 .

Aproximare spline cubică

Pentru a construi elementul a_{k+1} al șirului, vom folosi elementele a_{k-1}, a_k și valorile $g(a_{k-1}), g(a_k), g'(a_{k-1}), g'(a_k)$. Aproximăm funcția g cu un polinom de gradul al 3-lea:

$$g(a) \approx q(a) = c_0 a^3 + c_1 a^2 + c_2 a + c_3.$$

Funcția q , respectiv constantele $c_i, i = 0, \dots, 3$, se calculează astfel ca:

$$\begin{aligned} q(a_{k-1}) &= g(a_{k-1}) & , & & q(a_k) &= g(a_k) \\ q'(a_{k-1}) &= g'(a_{k-1}) & , & & q'(a_k) &= g'(a_k) \end{aligned}$$

Aproximare spline cubică

Elementul a_{k+1} este punctul de minim al funcției q și se calculează folosind următoarele formule:

$$a_{k+1} = a_k - (a_k - a_{k-1}) \frac{g'(a_k) + u_2 - u_1}{g'(a_k) - g'(a_{k-1}) + 2u_2}$$

$$u_1 = g'(a_{k-1}) + g'(a_k) - 3 \frac{g(a_k) - g(a_{k-1})}{a_k - a_{k-1}}$$

$$u_2 = \sqrt{u_1^2 - g'(a_{k-1})g'(a_k)}$$

Ajustarea inexactă a pasului

$$f(x + \tilde{\alpha} d) \approx \min \{ f(x + \alpha d) ; \alpha \in [0, \bar{\alpha}) \}.$$

- nu se obține $\tilde{\alpha}$ optimal;
- pentru reducerea timpului de lucru, procedeul de calcul a punctului de optim se oprește înainte de a ajunge la soluție, în funcție de anumite criterii/teste de oprire.

Ajustarea inexactă a pasului

Regula lui Armijo

$$g(a) = f(x_k + a d_k) \quad , \quad \bar{g}(a) = g(0) + \epsilon g'(0) \quad , \quad \epsilon \in (0, 1).$$

O valoare \bar{a} este acceptabilă după regula lui Armijo dacă:

1. $g(\bar{a}) \leq \bar{g}(\bar{a})$
2. $g(\sigma \bar{a}) \geq \bar{g}(\sigma \bar{a})$

$\sigma = 2$ sau 10 , $\epsilon = 0.2$.

Ajustarea inexactă a pasului - regula Armijo

$k = 0;$

se alege $a_0;$

while ($g(a_k) > \bar{g}(a_k)$)

- $a_{k+1} = \frac{1}{\sigma} a_k$
- $k = k + 1;$

Ajustarea inexactă a pasului

Testul Goldstein

Dat $\epsilon \in (0, 2)$, $\bar{\alpha}$ este considerat acceptabil dacă:

$$g(\bar{\alpha}) \leq \quad \text{și} \quad g(\bar{\alpha}) > g(0) + (1 - \epsilon)g'(0)$$

Alternativ, valoarea $\bar{\alpha}$ este acceptată dacă:

$$\epsilon \leq \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{\bar{\alpha} \nabla f(x_k)^T d_k} \leq 1 - \epsilon$$

Ajustarea inexactă a pasului

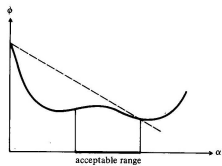
Testul Wolfe

Pentru $\epsilon \in (0, 2)$, o valoare $\bar{\alpha}$ îndeplinește condiția de acceptare dacă:

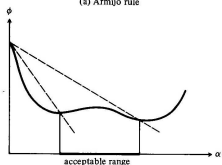
$$g(\bar{\alpha}) \leq \bar{g}(\bar{\alpha}) = g(0) + \epsilon g'(0)$$

$$g'(\bar{\alpha}) \geq (1 - \epsilon)g'(0)$$

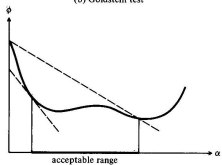
Ajustarea inexactă a pasului



(a) Armijo rule



(b) Goldstein test



(c) Wolfe test

Optimizare - forme pătratice

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ o matrice simetrică și pozitiv (semi)definită, $b \in \mathbb{R}^n$. Se numește **formă pătratică** o funcție $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definită astfel:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}(Ax, x)_{\mathbb{R}^n} - (b, x)_{\mathbb{R}^n} + c \\ &= \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b + c \quad , \quad c \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Optimizare - forme pătratice

Gradientul și matricea Hessiană a unei forme pătratice sunt:

$$\nabla f(x) = Ax - b \quad , \quad H_f(x) = \nabla^2 f(x) = A.$$

Dacă matricea A este pozitiv definită, avem $\det A \neq 0$ și funcția f este strict convexă. Orice punct de minim local este punct de minim global.

Problema de minimizare:

$$f(x^*) = \min \{ f(x) ; x \in \mathbb{R}^n \}$$

are un punct de minim unic, $x^* \in \mathbb{R}^n$. Acest punct unic de minim este soluția sistemului liniar:

$$Ax = b \quad , \quad x^* = A^{-1}b$$

Metoda pantei maxime (steepest descent)

Considerăm problema de minimizare pentru funcția
 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\min \{f(x); x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Soluția acestei probleme poate fi aproximată folosind un șir construit cu o metodă de descreștere:

$$x_0 \text{ dat}, \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

unde d_k este o direcție de descreștere a funcției f în x_k iar $\alpha_k > 0$ este soluția problemei de minimizare:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \min \{f(x_k + \alpha d_k); \alpha \in [0, \bar{\alpha})\}.$$

Metoda pantei maxime consideră ca direcția de descreștere:

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

Metoda pantei maxime - forme pătratică

$$g(x) = Ax - b$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad , \quad g_k = g(x_k) = Ax_k - b.$$

$$\alpha_k = \arg \min \{ f(x_k - \alpha g_k) ; \alpha \in [0, \bar{\alpha}) \}$$

$$f(x) = \frac{1}{2}(x_k - \alpha g_k)^T A(x_k - \alpha g_k) - (x_k - \alpha g_k)^T b + c$$

$$= \frac{1}{2}(g_k^T A g_k) \alpha^2 - (g_k^T A x_k - g_k^T b) \alpha + f(x_k)$$

$$= \frac{1}{2}(g_k^T A g_k) \alpha^2 - (g_k^T g_k) \alpha + f(x_k)$$

Metoda pantei maxime - forme pătratică

$f(x_k - \alpha g_k)$ - funcție polinomială de gradul 2 în α ,
coeficientul lui α^2 este pozitiv, $g_k^T A g_k > 0$ (A este pozitiv
definită). Punctul de minim al lui $f(x_k - \alpha g_k)$ este:

$$\alpha_{\min} = \alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k}$$

$$\alpha_k = \frac{\|g_k\|_2^2}{(A g_k, g_k)_{\mathbb{R}^n}}$$

Metoda pantei maxime - forme pătratică

x_0 - dat

$$g_k = Ax_k - b \quad , \quad \alpha_k = \frac{g_k^T g_k}{g_k^T A g_k}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad , \quad k = 0, 1, \dots$$

Metoda pantei maxime - f oarecare

x_0 - dat

$$g_k = \nabla f(x_k)$$

$$\alpha_k = \arg \min \{f(x_k - \alpha g_k); \alpha \in [0, \bar{\alpha})\}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad , \quad k = 0, 1, \dots$$

Metoda pantei maxime

Pentru f formă pătratică:

$$E(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T A(x - x^*) = f(x) + \frac{1}{2}(x^*)^T Ax^*$$

$$\nabla E(x) = \nabla f(x) = g(x)$$

Pentru forme pătratice, șirul construit cu metoda pantei maxime satisface relația:

$$E(x_{k+1}) = \left[1 - \frac{(g_k^T g_k)^2}{\left(g_k^T A g_k\right) \left(g_k^T A^{-1} g_k\right)} \right] E(x_k)$$

Inegalitatea lui Kantorovici

Pentru $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simetrică și pozitiv definită are loc inegalitatea:

$$\frac{(x^T x)^2}{(x^T A x)(x^T A^{-1} g_x)} \geq \frac{4cC}{(c+C)^2}$$

unde c este cea mai mică valoare proprie a matricei A și C este cea mai mare valoare proprie

Metoda pantei maxime - convergența

Teorema 6 (cazul pătratic)

Fie $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ o formă pătratică. Pentru orice iterație inițială x_0 , șirul construit cu metoda pantei maxime converge la x^* unicul punct de minim al funcției f , $x_k \rightarrow x^*$, $k \rightarrow \infty$. Are loc următoarea relație:

$$E(x_{k+1}) \leq \left(\frac{C - c}{C + c} \right)^2 E(x_k).$$

Metoda pantei maxime - convergența

Teorema 7 (cazul general)

Fie funcția $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$. Presupunem că $x^* \in \mathbb{R}^n$ este un punct de minim local al funcției f . Presupunem că matricea Hessiană $H_f(x^*) = \nabla^2 f(x^*)$ are $c > 0$ cea mai mică valoare proprie și $C > 0$ cea mai mare valoare proprie (matricea Hessiană $H_f(x^*)$ este pozitiv definită). Dacă șirul (x_k) construit cu metoda pantei maxime converge la x^* , $x_k \rightarrow x^*$, $k \rightarrow \infty$ atunci are loc următoarea relație:

$$f(x_{k+1}) - f(x^*) \leq \left(\frac{C - c}{C + c} \right)^2 [f(x_k) - f(x^*)].$$

Metoda gradientului descendent

x_0 – dat

$$x_{k+1} = x_k - \eta \nabla f(x_k) \quad , \quad k = 0, 1, \dots$$

η este o valoare mică, pozitivă ($\eta = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots$), care poartă numele de **rată de învățare**.

Pentru probleme de maximizare metoda se numește a gradientului ascendent și are forma:

x_0 – dat

$$x_{k+1} = x_k + \eta \nabla f(x_k) \quad , \quad k = 0, 1, \dots$$

Metoda Newton

Fie x_k iterația curentă a șirului care aproximează soluția problemei de minimizare:

$$\min \{f(x); x \in \mathbb{R}^n \}.$$

Scriem dezvoltarea în serie Taylor de ordinul 2 în jurul punctului x_k :

$$f(x) = g(y) + R(\|x - x_k\|^3) \quad , \quad y = x - x_k$$

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

$$= \frac{1}{2} y^T A y - y^T b + c \quad ,$$

$$A = \nabla^2 f(x_k) \quad , \quad b = -\nabla f(x_k) \quad , \quad c = f(x_k)$$

Metoda Newton

Problema de minimizare:

$$\min \{ g(y) ; y \in \mathbb{R}^n \}$$

are un unic punct de minim y^* , dacă matricea A este simetrică și pozitiv definită. Acest punct de minim este soluția sistemului liniar $Ay = b$:

$$y^* = A^{-1}b = [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

Șirul construit cu **metoda Newton** are următoarea formulă de recurență:

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) , k = 0, 1, \dots , x_0 - \text{dat}$$

Metoda Newton - convergența

Teorema 8

Fie $f \in C^3(\mathbb{R}^n)$ o funcție care are un punct de minim local x^* , pentru care matricea Hessiană, $\nabla^2 f(x^*)$, este pozitiv definită. Dacă iterația inițială x_0 este suficient de apropiată de soluția x^* , $\|x_0 - x^*\| \leq r$, atunci șirul $\{x_k\}$ construit cu metoda lui Newton converge la x^* și ordinul de convergență este cel puțin 2:

$$x_k \longrightarrow x^* \quad , \quad k \longrightarrow \infty \quad , \quad \|x_0 - x^*\| \leq r.$$

Metode cvasi-Newton - BFGS

Se folosesc aproximări, calculate iterativ, ale matricei Hessiene sau ale inversei acestei matrice.

Metoda Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno

1. x_0 - dat, $H_0 = I_n$ sau $H_0 = a I_n$, $k = 0$;
2. Calculeaza direcția de căutare $p_k = -H_k \nabla f(x_k)$;
3. Calculează $\alpha_k > 0$ cu ajustarea inexactă a pasului Wolfe

4. $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

5. $s_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$, $\rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k}$

6. Se actualizează matricea H_{k+1}

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

7. $k = k + 1$

Metode cvasi-Newton

Metoda **SR1** (symmetric-rank-1)

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

Metode **Broyden**

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

Alegerea vectorului u_k definește metoda de tip Broyden (este 'parametrul' metodei Broyden).

Cu H_k se notează aproximări ale inversei matricei Hessiene iar cu B_k aproximări ale matricei Hessiene.

Metoda gradientilor conjugați (a direcțiilor conjugate)

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, o matrice simetrică, $A = A^T$ și pozitiv definită și $b \in \mathbb{R}^n$.

Fie problema de minimizare a formei pătratice definite cu matricea A și vectorul b :

$$\min \{ f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b; x \in \mathbb{R}^n \}.$$

Definiție

Pentru o matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, simetrică, $A = A^T$, doi vectori $d_1, d_2 \in \mathbb{R}^n$ se numesc **A-ortogonali** sau **conjugați în raport cu A** dacă:

$$d_1^T A d_2 = (A d_2, d_1)_{\mathbb{R}^n} = (d_2, A d_1)_{\mathbb{R}^n} = (A d_1, d_2)_{\mathbb{R}^n} = 0.$$

Metoda gradientelor conjugați

$A = 0_{n \times n} \Rightarrow \forall d_1, d_2$ sunt A ortogonali

$A = I_n \Rightarrow$ ortogonalitate clasică, $(d_1, d_2)_{\mathbb{R}^n} = 0$.

Vectorii $\{d_0, d_1, \dots, d_k\}$ se numesc **A-ortogonali** sau **A-conjugați** dacă:

$$d_i^T A d_j = (A d_j, d_i)_{\mathbb{R}^n} = 0, \forall i \neq j, i, j = 0, 1, \dots, k.$$

Propoziție

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, o matrice simetrică, $A = A^T$ și pozitiv definită și $\{d_0, d_1, \dots, d_k\}$ direcții A -conjugate, $d_i \neq 0, \forall i = 0, \dots, k$. Atunci vectorii $\{d_0, d_1, \dots, d_k\}$ sunt liniar independenți.

Metoda gradientilor conjugați

Dacă $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, este matrice simetrică, $A = A^T$ și pozitiv definită, iar $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$ sunt n direcții A -conjugate atunci $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$ formează o bază în \mathbb{R}^n .

$$x^* = \arg \min \{f(x); x \in \mathbb{R}^n\} \Leftrightarrow x^* = A^{-1}b \quad (Ax^* = b)$$

Putem scrie soluția x^* în raport cu baza de n vectori A -conjugăți, $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$:

$$x^* = \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \dots + \alpha_{n-1} d_{n-1}$$

Metoda gradientelor conjugați

Din relația:

$$(Ax^*, d_i)_{\mathbb{R}^n} = (b, d_i)_{\mathbb{R}^n} = d_i^T Ax^* = \alpha_i d_i^T Ad_i$$

rezultă că:

$$\alpha_i = \frac{d_i^T b}{d_i^T Ad_i} = \frac{(b, d_i)_{\mathbb{R}^n}}{(Ad_i, d_i)_{\mathbb{R}^n}}$$

Dacă știm n direcții A -conjugate, soluția sistemului $Ax = b$ și a problemei de minimizare cu forme pătratice se poate scrie astfel:

$$x^* = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(b, d_i)_{\mathbb{R}^n}}{(Ad_i, d_i)_{\mathbb{R}^n}} d_i$$

Metoda gradientilor conjugați

Procesul iterativ:

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat}$$

$$g_k = Ax_k - b \quad , \quad \alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad , \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

are proprietatea că $x_n = x^*$.

Considerăm următoarele relații:

$$x_k = x_0 + \alpha_0 d_0 + \alpha_1 d_1 + \dots + \alpha_{k-1} d_{k-1}$$

$$x^* = x_0 + \beta_0 d_0 + \beta_1 d_1 + \dots + \beta_{n-1} d_{n-1}$$

Metoda gradientilor conjugați

Avem următoarele relații:

$$\alpha_i = \frac{d_i^T A(x_k - x_0)}{d_i^T A d_i} \quad , \quad \beta_i = \frac{d_i^T A(x^* - x_0)}{d_i^T A d_i}$$

$$d_k^T A(x_k - x_0) = 0.$$

$$x^* - x_k = (\beta_0 - \alpha_0) d_0 + \dots + (\beta_{k-1} - \alpha_{k-1}) d_{k-1} + \beta_k d_k + \dots + \beta_{n-1} d_{n-1}.$$

$$g_k^T d_i = 0 \quad \forall i < k.$$

Algoritmul gradientilor conjugați

$$x_0 \in \mathbb{R}^n, g_0 = Ax_0 - b$$

$$d_0 = -g_0 = b - Ax_0$$

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k}$$

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

$$g_{k+1} = Ax_{k+1} - b \text{ sau } g_{k+1} = g_k + \alpha_k A d_k$$

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k}$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

Metoda gradientilor conjugați

Fie $y_1, y_2, \dots, y_p \in \mathbb{R}^n$. Facem următoarea notație:

$$\begin{aligned}\text{span}\{y_1, y_2, \dots, y_p\} &= \{y \in \mathbb{R}^n; y = a_1 y_1 + \dots + a_p y_p, a_i \in \mathbb{R}\} \\ &= \text{subspațiul generat de vectorii } y_1, y_2, \dots\end{aligned}$$

$$\mathcal{K}(g_0, k) = \text{span}\{g_0, Ag_0, \dots, A^k g_0\}$$

Acest subspațiu se numește **subspațiu Krylov de grad k pentru vectorul g_0** .

Metoda gradientilor conjugați

Teorema 9

Presupunem că $x_k \neq x^*$. Avem relațiile:

$$(1) \quad g_k^T g_i = 0 \quad , \quad \forall i = 0, 1, \dots, k-1$$

$$(2) \quad \text{span}\{g_0, g_1, \dots, g_k\} = \text{span}\{g_0, Ag_0, \dots, A^k g_0\}$$

$$(3) \quad \text{span}\{d_0, d_1, \dots, d_k\} = \text{span}\{g_0, Ag_0, \dots, A^k g_0\}$$

$$(4) \quad d_k^T A d_i = 0 \quad , \quad \forall i = 0, 1, \dots, k-1$$

Șirul x_k converge la soluția x^* în cel mult n pași.

Algoritmul gradientilor conjugați - forma practică

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat}, k = 0$$

$$g_0 = Ax_0 - b, d_0 = -g_0$$

while ($g_k \neq 0$)

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T g_k}{d_k^T A d_k}$$

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

$$g_{k+1} = g_k + \alpha_k A d_k$$

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T g_{k+1}}{g_k^T g_k}$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k = k + 1$$

Metoda gradientilor conjugați - convergența

Cu ajutorul unei matrice A în $\mathbb{R}^{n \times n}$ simetrică și pozitiv definită, se definește următoarea normă matriceală:

$$\|x\|_A = \sqrt{(Ax, x)_{\mathbb{R}^n}}$$

Teorema 10

Dacă matricea A are doar r valori proprii distincte, atunci algoritmul gradientilor conjugați calculează soluția x^* în cel mult r iterații

Metoda gradientilor conjugați - convergența

Teorema 11

Dacă $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ sunt valorile proprii ale matricei A atunci:

$$\|x_{k+1} - x^*\|_A^2 \leq \left(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1} \right)^2 \|x_0 - x^*\|_A^2$$

$$\|x_{k+1} - x^*\|_A^2 = 2E(x_{k+1})$$

$$E(x_{k+1}) \leq \left(\frac{\lambda_{n-k} - \lambda_1}{\lambda_{n-k} + \lambda_1} \right)^2 E(x_0)$$

Metodele gradientilor conjugați neliniare

$\min \{f(x); x \in \mathbb{R}^n\}$, f funcție oarecare, neliniară

Pentru a calcula elementul x_{k+1} , se folosește aproximarea pătritică a funcției f dată de dezvoltarea în serie Taylor în jurul punctului x_k :

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

În metoda gradientilor conjugați se fac următoarele înlocuiri:

$$\begin{aligned} g_k &\leftrightarrow \nabla f(x_k) \\ A &\leftrightarrow \nabla^2 f(x_k) \end{aligned}$$

Algoritmul gradientilor conjugați - funcții oarecare

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat} , k = 0$$

$$g_0 = \nabla f(x_0); d_0 = -g_0$$

while ($g_k \neq 0$)

$$A = \nabla^2 f(x_k);$$

$$\alpha_k = -\frac{g_k^T d_k}{d_k^T A d_k}$$

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

$$g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$$

$$\beta_k = \frac{g_{k+1}^T A d_k}{d_k^T A d_k}$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k d_k$$

$$k = k + 1$$

Algoritmul gradientilor conjugați - metoda Fletcher-Reeves

$$x_0 \in \mathbb{R}^n - \text{dat} , k = 0$$

$$g_0 = \nabla f(x_0); d_0 = -g_0$$

while ($g_k \neq 0$)

$$\alpha_k = \min \{ f(x_k + \alpha d_k); \alpha \in [0, \bar{\alpha}) \}$$

(exact sau inexact cu testul Wolfe)

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

$$g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$$

$$\beta_k^{\text{FR}} = \frac{g_{k+1}^T g_k}{g_k^T g_k}$$

$$d_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_k^{\text{FR}} d_k$$

$$k = k + 1$$

Metoda Fletcher-Reeves

Sunt vectorii d_k construiți cu metoda Fletcher-Reeves direcții de descreștere?

$$d_k = -g_k + \beta_{k-1}d_{k-1}$$

$$g_k^T d_k = -g_k^T g_k + \beta_{k-1} g_k^T d_{k-1}$$

Dacă se folosește ajustarea exactă a pasului:

α_{k-1} este punctul de minim local pentru funcția f pe direcția d_{k-1} , ceea ce implică faptul că:

$$\nabla f(x_k)^T d_{k-1} = g_k^T d_{k-1} = 0$$

Prin urmare:

$$g_k^T d_k = -g_k^T g_k = -\|g_k\|_2^2 < 0 \Rightarrow d_k \text{ direcție de descreștere.}$$

Metoda Fletcher-Reeves

Dacă se folosește ajustarea inexactă a pasului am putea avea $g_k^T d_k > 0$ (d_k direcție de creștere!!) dar dacă se folosește testului Wolfe avem:

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f(x_k) + \epsilon \alpha_k g_k^T d_k$$

$$|\nabla f(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k| \leq (1 - \epsilon) |g_k^T d_k|$$

$$\epsilon \in \left(0, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow g_k^T d_k < 0.$$

Metoda Polak-Ribière

Este o variantă a metodei Fletcher-Reeves:

$$\beta_k^{\text{PR}} = \frac{g_{k+1}^T (g_{k+1} - g_k)}{g_k^T g_k}$$

Dacă se face ajustarea inexactă a pasului cu testul lui Wolfe, nu putem deduce că d_k sunt direcții de descreștere. Se folosește modificarea:

$$\beta_k^+ = \max \{ \beta_k^{\text{PR}}, 0 \}$$

și un test Wolfe adaptat pentru a face direcțiile d_k , direcții de descreștere.

Varianta Hestenes-Stiefel

$$\beta_k^{\text{HS}} = \frac{g_{k+1}^T (g_{k+1} - g_k)}{(g_{k+1} - g_k)^T d_k}$$

Precondiționarea sistemelor liniare

Considerăm sistemul liniar cu matricea sistemului A simetrică și pozitiv definită:

$$Ax = b \quad , \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad , \quad b \in \mathbb{R}^n .$$

Folosind matricea A , se poate construi următoarea normă vectorială:

$$\|x\|_A = \sqrt{(Ax, x)_{\mathbb{R}^n}}$$

Următoarea formulă ne dă o evaluare a erorii absolute la aplicarea metodei pantei maxime:

$$\|x_k - x^*\|_A \leq \left(\frac{k(A) - 1}{k(A) + 1} \right)^k \|x_0 - x^*\|_A$$

Precondiționare

$K(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ – numărul de condiționare spectrală

$0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ – valorile proprii ale matricei A

Dacă numărul de condiționare $k(A)$ este apropiat de 1 atunci avem convergență rapidă a șirului (x_k) la soluția sistemului $Ax = b$ ($k(A) \geq 1$ întotdeauna).

Ideea precondiționării este de a transforma sistemul $Ax = b$ astfel încât să îmbunătățim proprietățile spectrale.

$$Ax = b \quad \leftrightarrow \quad \tilde{A}x = \tilde{b} \quad \text{cu} \quad k(\tilde{A}) \ll k(A).$$

Matricea de preconditionare

Precondționare la stânga:

$$Ax = b \quad \leftrightarrow \quad M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

Precondționare la dreapta:

$$Ax = b \quad \leftrightarrow \quad AM^{-1}y = b, \quad x = M^{-1}y$$

Precondționare la stânga-dreapta:

$$Ax = b \quad \leftrightarrow \quad M_1^{-1}AM_2^{-1}y = M_1^{-1}b, \quad x = M_2^{-1}y, \quad M = M_1M_2$$

Matricea M (sau M^{-1} poartă numele de **matrice de preconditionare**. Matricea de preconditionare trebuie să fie nesingulară, $M \approx A$.

Matricea de preconditionare

Cum trebuie să alegem matricea M ?

- ▶ sistemul preconditionat ($\tilde{A}x = \tilde{b}$) să fie ușor de rezolvat (convergență rapidă)
- ▶ matricea de preconditionare să fie economic de construit și aplicat – ietrațiile să nu fie costisitor de construit

Matrice de preconditionare

Matricea de preconditionare Jacobi:

$$M = \mathbf{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}) = \mathbf{diag}(A).$$

Matricea de preconditionare SSOR, $A = L + D + L^T$:

$$M = (D + L)D^{-1}(D + L)^T;$$

$$M(\omega) = \frac{1}{2 - \omega} \left(L + \frac{1}{\omega} D \right) \left(\frac{1}{\omega} D \right)^{-1} \left(L + \frac{1}{\omega} D \right)^T, \quad \omega \in (0, 2)$$

Pentru ω optimal, în anumite cazuri avem:

$$k(M(\omega_{opt})^{-1}A) = \mathcal{O}(\sqrt{k(A)})$$

(ω_{opt} - foarte costisitor de calculat).