Διάλεξη 10

Ο Αλγόριθμος Newton (πολλές μεταβλητές), Πέμπτη 22/3/18

Ο αλγόριθμος Newton που είδαμε στη Διάλεξη 6 αναζητά σημεία μηδενισμού της παραγώγου για αντικειμενικές συναρτήσεις μιας μεταβλητής. Στη σημερινή διάλεξη θα δούμε ότι μπορεί να γενικευτεί για πολλές μεταβλητές για την αναζήτηση σημείων μηδενισμού του διανύσματος κλίσης.

Περιεχόμενα

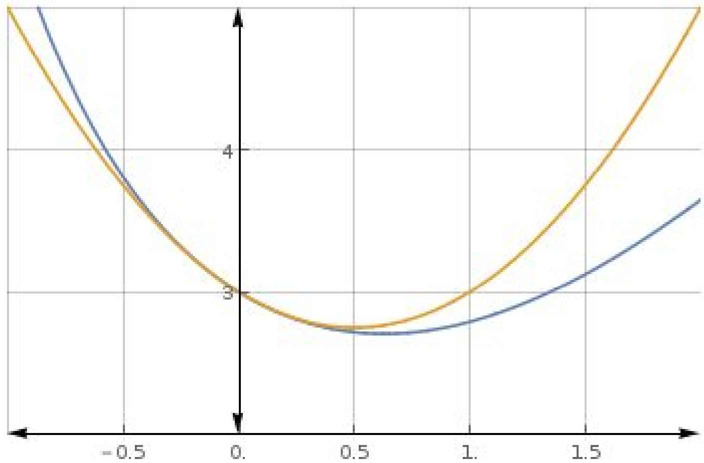
Μια δεύτερη ματιά στον αλγόριθμο Newton για μια μεταβλητή

Πρώτα θα δούμε τον αλγόριθμο Newton για συναρτήσεις μιας μεταβλητής υπό μια διαφορετική μορφή, η οποία προσφέρεται για γενίκευση στις πολλές διαστάσεις.

Η αντικειμενική συνάρτηση $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ συνήθως είναι αρκετά πολύπλοκη ώστε η εξίσωση $f'(x^*) = 0$ να μπορεί να λυθεί σε κλειστή μορφή. Αυτό θα μπορούσε εύκολα να γίνει εάν πχ, η f ήταν τετραγωνική συνάρτηση, δηλαδή $f(x) = ax^2 + bx + c$ για κάποιες σταθερές $a \neq 0, b, c$. Σε αυτή την περίπτωση $f'(x^*) = 0 \Leftrightarrow x^* = -\dfrac{b}{2a}$.

Μια ιδέα για την προσέγγιση της ρίζας x^* όταν η f' έχει πολύπλοκη μορφή είναι να βρούμε τη ρίζα $\tilde{x}^*$ της παραγώγου μιας τετραγωνικής συνάρτησης που “ταιριάζει” στην f σε κάποιο σημείο x_0. Θα θεωρήσουμε ότι μια τετραγωνική συνάρτηση $\tilde{f}$ ταιριάζει στην f στο σημείο x_0 εάν η τιμές τους, οι πρώτες και δεύτερες παράγωγοι τους ταιριάζουν, δηλαδή $\tilde{f}(x_0) = f(x_0), \tilde{f}'(x_0) = f'(x_0), \tilde{f}''(x_0) = f''(x_0)$. Από τις συνθήκες αυτές συμπεραίνουμε ότι οι σταθερές a, b, c πρέπει να ικανοποιούν $a = f''(x_0)/2, b = f'(x_0) - f''(x_0)x_0, c = f + \frac{f''(x_0)}{2}x_0^2 - f'(x_0)x_0$.

Παράδειγμα



Η συνάρτηση $f(x) = 3e^{-x} + x - \log\left(x + e^{-x}\right)$ (μπλέ καμπύλη στο σχήμα) ταιριάζει με την τετραγωνική συνάρτηση $\tilde{f}(x) = x^2 - x + 3$ (η κόκκινη καμπύλη) στο σημείο $x_0 = 0$ (γιατί;). Η βέλτιστη λύση $x^* \approx 0.63$ του προβλήματος $\min_x f(x)$ είναι κοντά στη βέλτιστη λύση $\tilde{x}^* = 0.5$ του $\min_x \tilde{f}(x)$. ■

Μπορούμε να εκφράσουμε την προσέγγιση $\tilde{x}^*$ ως συνάρτηση του σημείου “ταιριάσματος” x_0: $\tilde{x}^* = \frac{-b}{2a} = x_0 - \frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}$ όπου αντικαταστήσαμε τις τιμές των a, b, c με αυτές που βρήκαμε παραπάνω. Εάν επαναλάβουμε τη διαδικασία αυτή ταιριάζοντας στο σημείο $x_1 = \tilde{x}^*$ παίρνουμε μια νέα προσέγγιση x_2 κοκ. Παρατηρήστε ότι η προσέγγιση στη $n+1$-οστή επανάληψη δίνεται από το βήμα Newton: $x_{n+1} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$

Στην επόμενη παράγραφο γενικεύουμε τον αλγόριθμο Newton για πολλές μεταβλητές, ταιριάζοντας σε κάθε βήμα την αντικειμενική συνάρτηση με μια πολυδιάστατη τετραγωνική συνάρτηση.

Ο αλγόριθμος Newton για πολλές μεταβλητές

Τετραγωνικές συναρτήσεις πολλών μεταβλητών

Μια τετραγωνική συνάρτηση $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ πολλών μεταβλητών $x_1, \ldots, x_n$ είναι της μορφής $g(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j + \sum_i b_i x_i + c$ για σταθερές $a_{ij} = a_{ji}, b_i, c \in \mathbb{R}$. Σε διανυσματική μορφή: $g(\vec{x}) = \vec{x}^T A \vec{x} + \vec{b}^T \vec{x} + c$, όπου $\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n), \vec{b} = (b_1, \ldots, b_n)$ διανύσματα-στήλες, $c \in \mathbb{R}$ και $A = [a_{ij}]_{1 \leq i,j \leq n}$ συμμετρικός $n \times n$ πίνακας.

Θα χρειαστούμε το διάνυσμα κλίσης και την Εσσιανή τετραγωνικών συναρτήσεων:

ΛΗΜΜΑ [Παράγωγοι τετραγωνικών συναρτήσεων]:

Έστω $g(\vec{x}) = \vec{x}^T A \vec{x} + \vec{b}^T \vec{x} + c$***. Τότε***

1. $\nabla g(\vec{x}) = 2A\vec{x} + \vec{b}$
2. $H(g, \vec{x}) = 2A$

Απόδειξη: Γράψτε τη g στη μορφή $g(\vec{x}) = \sum_{i,j \neq k} a_{ij} x_i x_j + 2 \sum_i a_{ki} x_k x_i + a_{kk} x_k^2 + \sum_i b_i x_i + c$ και παρατηρήστε ότι $\frac{\partial g(\vec{x})}{\partial x_k} = 2 \sum_i a_{ki} x_i + b_k$, δηλαδή $\nabla g(\vec{x}) = 2A\vec{x} + \vec{b}$. Παραγωγίζοντας ξανά βρίσκουμε $\frac{\partial^2 g(\vec{x})}{\partial x_k \partial x_l} = 2a_{kl}$, δηλαδή $H(g, \vec{x}) = 2A$. ■

Όπως και στην περίπτωση μιας διάστασης, η νέα εκτίμηση $\vec{x}_{n+1}$ είναι η βέλτιστη λύση του προβλήματος $\min_{\vec{x}} \tilde{f}(\vec{x})$, όπου $\tilde{f}$ είναι τετραγωνική συνάρτηση (πολλών μεταβλητών) που ταιριάζει στη f στο σημείο $\vec{x}_n$. Πάλι, θεωρούμε ότι δύο συναρτήσεις ταιριάζουν εάν ταιριάζουν οι τιμές τους και οι μερικές παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης, δηλαδή $\tilde{f}(\vec{x}_n) = f(\vec{x}_n), \frac{\partial \tilde{f}(\vec{x}_n)}{\partial x_i} = \frac{\partial f(\vec{x}_n)}{\partial x_i}, \frac{\partial^2 \tilde{f}(\vec{x}_n)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f(\vec{x}_n)}{\partial x_i \partial x_j}$ για κάθε i, j ή σε διανυσματική μορφή: $\tilde{f}(\vec{x}_n) = f(\vec{x}_n), \nabla \tilde{f}(\vec{x}_n) = \nabla f(\vec{x}_n), H(\tilde{f}, \vec{x}_n) = H(f, \vec{x}_n)$. Από τις συνθήκες αυτές συμπεραίνουμε ότι πρέπει $A = \frac{1}{2}H(f, \vec{x}_n), \vec{b} = \nabla f(\vec{x}_n) - H(f, \vec{x}_n)\vec{x}_n$. (Η τιμή της c δεν έχει σημασία αφού δεν αλλάζει τη βέλτιστη λύση.)

Τώρα από την αναγκαία συνθήκη του Θεωρήματος 7.2 παίρνουμε ότι $\nabla \tilde{f}(\vec{x}_{n+1}) = 0 \Leftrightarrow H(f, \vec{x}_n)\vec{x}_{n+1} + \nabla f(\vec{x}_n) - H(f, \vec{x}_n)\vec{x}_n = 0$ ή ισοδύναμα $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - H(f, \vec{x}_n)^{-1}\nabla f(\vec{x}_n)$ στην περίπτωση που η Εσσιανή $H(f, \vec{x}_n)$ είναι αντιστρέψιμος πίνακας.

Συνεπώς καταλήγουμε στον αλγόριθμο:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ NEWTON

Είσοδος: αρχική εκτίμηση $\vec{x}_0$

1. **Θέσε** $n = 0$**.**
2. **Υπολογισμός** $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - H(f, \vec{x}_n)^{-1}\nabla f(\vec{x}_n)$
3. **Επανάληψη του 2**

Οι εκτιμήσεις $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots$ που παράγει ο αλγόριθμος Newton μπορεί να μη συγκλίνουν εάν η αρχική εκτίμηση $\vec{x}_0$ βρίσκεται μακριά από σημείο $\vec{x}^*$ μηδενισμού του διανύσματος κλίσης. Για να επιτυγχάνεται πάντα η σύγκλιση συνήθως η διεύθυνση που υπολογίζει ο Newton συνδυάζεται με τη μέθοδο της οπισθοδρόμησης:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ NEWTON ΜΕ ΟΠΙΣΘΟΔΡΟΜΗΣΗ

Είσοδος: αρχική εκτίμηση $\vec{x}_0$**,** $c \in (0, 1)$

1. **Θέσε** $n = 0$**.**
2. **Υπολογισμός διεύθυνσης** $\vec{\delta} = -H(f, \vec{x}_n)^{-1}\nabla f(\vec{x}_n)$
3. **Υπολογισμός** $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + t\vec{\delta}$ **με τη μέθοδο της οπισθοδρόμησης για συντελεστή** c
4. **Επανάληψη του 2**

Ανάλυση