1DE2116:A - Matematyka - Metody optymalizacji EP
Metoda Newtona

Maciej Twardy

Materiał przygotowany w ramach projektu „NERW 2 PW. Nauka – Edukacja – Rozwój - Współpraca”. Projekt współfinansowany przez Unie Europejska w ramach Europejskiego Funduszu Społeczego. Program Operacyjny Wiedza Edukacja Rozwój 2014-2020, Os priorytetowa III Szkolnictwo Wyzsze dla gospodarki i rozwoju, Działanie 3.5 Kompleksowe programy szkół wyższych.

1 Preliminaria

Metoda Newtona jest jedną z najważniejszych metod optymalizacji. Szczegółowe omówienie tej metody można znaleźć np. w [1].

1.1 Rozwiązywanie układów równań nieliniowych metodą Newtona

Metoda Newtona polega na wyznaczeniu rozwiązania układu nieliniowych równań

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \tag{1}$$

gdzie

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \quad f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ f_n(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \tag{2}$$

przez rozwiązanie sekwencji układów równań liniowych

$$f(\boldsymbol{x}_k) + \mathrm{D}f(\boldsymbol{x}_k)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{0}, \quad k = 0, 1, \dots \tag{3}$$

gdzie

$$\mathrm{D}f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}. \tag{4}$$

Jeśli $\det\left[\mathrm{D}f(\boldsymbol{x}_k)\right] \neq 0$ to rozwiązaniem układu równań (3) jest

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_k - \left[\mathrm{D}f(\boldsymbol{x}_k)\right]^{-1} f(\boldsymbol{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots \tag{5}$$

skąd otrzymuje się wzór rekurencyjny metody Newtona

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \left[\mathrm{D}f(\boldsymbol{x}_k)\right]^{-1} f(\boldsymbol{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots \tag{6}$$

Dysponując punktem startowym $\boldsymbol{x}_0$ i korzystając ze wzoru (6) możemy wyznaczyć ciąg $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots$, który pod pewnymi warunkami jest zbieżmy do rozwiązania układu (1).

Przykład 1. Weźmy pod uwagę zadanie wyznaczenia rzeczywistego pierwiastka kwadratowego pewnej dodatniej liczby rzeczywistej $\varrho > 0$. Pierwiastkiem kwadratowym liczby $\varrho > 0$, oznaczanym $\sqrt{\varrho}$ nazywamy liczbę $\xi > 0$ taką, że $\xi^2 = \varrho$. Łatwo zauważyć, że ξ jest dodatnim rozwiązaniem równania $f(x) = 0$ dla $f(x) = x^2 - \varrho$. Uwzględniając, że $f'(x) = 2x$ i korzystając ze wzoru (6) otrzymujemy

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - \varrho}{2x_k}, \quad k = 0, 1, \dots \tag{7}$$

czyli

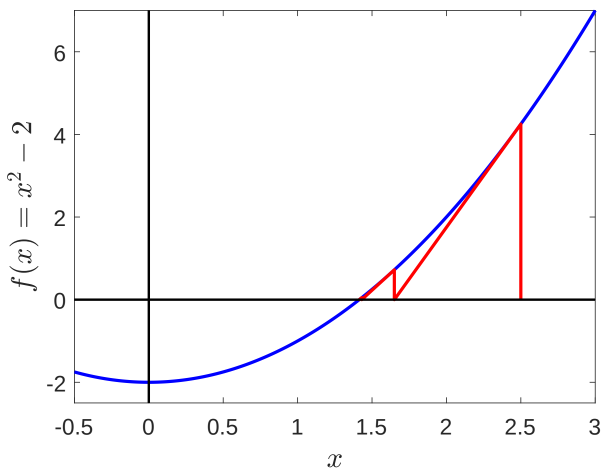
$$x_{k+1} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{\varrho}{x_k}\right), \quad k = 0, 1, \dots \tag{8}$$

Jako punkt początkowy x_0, w rozpatrywanym przypadku, możemy przyjąć dowolną liczbą dodatnią.

Rozpatrzmy, przykładowo, problem wyznaczenia $\sqrt{2}$, tzn. sytuację gdy $\varrho = 2$. Jako punkt startowy przyjmijmy $x_0 = 2.5$. Korzystając z (8) otrzymujemy

$$\begin{aligned} x_0 &= 2.500000000000000 \\ x_1 &= 1.650000000000000 \\ x_2 &= 1.431060606060606 \\ x_3 &= 1.414312727593564 \\ x_4 &= 1.414213565849604 \\ x_5 &= 1.414213562373095 \end{aligned}$$

Wartość $\sqrt{2}$ z dokładnością do 15 miejsc po przecinku wynosi 1.414213562373095, jak można zauważyć, dla przyjętego punktu startowego otrzymuje się ją już w piątej iteracji. Interpretację geometryczną pierwszych dwóch iteracji przedstawia Rys. 1.



Rysunek 1: Interpretacja geometryczna pierwszych dwóch iteracji metody Newtona przy wyznaczaniu $\sqrt{2}$. Punkt startowy $x_0 = 2.5$.

1.2 Metoda Newtona w optymalizacji

Często spotykanym w optymalizacji problemem jest wyznaczenie rozwiązania układu równań nieliniowych

$$\nabla f_0(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}. \tag{9}$$

Podstawiając $f(\boldsymbol{x}) \equiv \nabla f_0(\boldsymbol{x})$, oraz uwzględniając, że

$$\begin{aligned} \mathrm{D}\left\{\nabla f_0(\boldsymbol{x})\right\} &= \mathrm{D}\begin{bmatrix} \frac{\partial f_0}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_0}{\partial x_n} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial f_0}{\partial x_1}\right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n}\left(\frac{\partial f_0}{\partial x_1}\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\partial f_0}{\partial x_n}\right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n}\left(\frac{\partial f_0}{\partial x_n}\right) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_1 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f_0}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

tzn.

$$\mathrm{D}\left\{\nabla f_0(\boldsymbol{x})\right\} = \nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}), \tag{10}$$

otrzymujemy z zależności (6) rekurencyjny wzór metody Newtona.

$$\boxed{\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}_k)\right]^{-1} \nabla f_0(\boldsymbol{x}_k).} \tag{11}$$

Metoda Newtona (wersja A)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, liczba iteracji N

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
for $k = 1 : N$
  $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} - \left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

Metoda Newtona (wersja B)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, $\epsilon > 0$

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
$\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
$\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
$\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
while $\Delta > \epsilon$
  $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}$
  $\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
  $\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
  $\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

Wielkość $\sqrt{\Delta}$, gdzie $\Delta \equiv \left[\nabla f_0(\boldsymbol{x})\right]^{\mathrm{T}} \left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \nabla f_0(\boldsymbol{x})$, nazywamy dekrementem Newtona (ang. *Newton's decrement*). Algorytm Newtona kończy działanie, kiedy kwadrat dekrementu spada poniężej pewnej ustalonej wartości ϵ.

Metoda Newtona (wersja C)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, $\epsilon > 0$

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
while 1
  $\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
  $\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
  $\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
  if $\Delta < \epsilon$
    break
  else
    $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}$
  end
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

W praktyce zamiast klasycznego wzoru Newtona (11) używa się tzw. metody Newtona z tłumieniem, w której

$$\boxed{\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - s_k \left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}_k)\right]^{-1} \nabla f_0(\boldsymbol{x}_k),} \tag{12}$$

gdzie parametr $s_k > 0$ jest tzw. czynnikiem skalującym (czasami zwanym też, niezbyt ścieśle, długością kroku), którego wartość najczęściej wyznacza się tzw. metodą *backtracking line search*, tzn. dla przyjętych wartości parametrów $\alpha \in (0,\, 1)$, $\beta \in (0,\, 1)$ oraz kierunku poszukiwań

$$\boldsymbol{v}_k = -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}_k)\right]^{-1} \nabla f_0(\boldsymbol{x}_k \tag{13}$$

iterujemy

$s \leftarrow 1$
while $f_0(\boldsymbol{x}_k + s\boldsymbol{v}_k) > f_0(\boldsymbol{x}_k) + s\alpha\nabla f_0(\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k$
  $s \leftarrow \beta s$
end
$s_k \leftarrow s$

Metoda Newtona z tłumieniem (wersja A)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, liczba iteracji N

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
for $k = 1 : N$
  $\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
  $\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
  $s \leftarrow 1$
  while $f_0(\boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}) > f_0(\boldsymbol{x}) + s\alpha\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
    $s \leftarrow \beta s$
  end
  $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}$
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

Metoda Newtona z tłumieniem (wersja B)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, $\epsilon > 0$

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
$\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
$\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
$\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
while $\Delta > \epsilon$
  $s \leftarrow 1$
  while $f_0(\boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}) > f_0(\boldsymbol{x}) + s\alpha\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
    $s \leftarrow \beta s$
  end
  $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}$
  $\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
  $\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
  $\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

Metoda Newtona z tłumieniem (wersja C)

dane: punkt startowy $\boldsymbol{x}_0$, $\epsilon > 0$

$\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x}_0$
while 1
  $\boldsymbol{g} \leftarrow \nabla f_0(\boldsymbol{x})$
  $\boldsymbol{v} \leftarrow -\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x})\right]^{-1} \boldsymbol{g}$
  $\Delta \leftarrow -\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
  if $\Delta < \epsilon$
    break
  else
  $s \leftarrow 1$
  while $f_0(\boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}) > f_0(\boldsymbol{x}) + s\alpha\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}$
    $s \leftarrow \beta s$
  end
    $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + s\boldsymbol{v}$
  end
end
$\boldsymbol{x}_{\text{optimal}} \leftarrow \boldsymbol{x}$

2 Zadania

Zadanie 1. Napisać skrypt w środowisku Matlab do szukania minimum funkcji metodą Newtona oraz metodą Newtona z tłumieniem. Zakładamy, że znana z góry funkcja $f_0 : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ jest postaci

$$f_0(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} + \mathrm{e}^{-x_1-0.1} + (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_\mathrm{c})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_\mathrm{c}) \quad (14)$$

gdzie

$$\boldsymbol{P} = \frac{1}{8}\begin{bmatrix} 7 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 5 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{x}_\mathrm{c} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Jako punkt startowy przyjąć

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad (16)$$

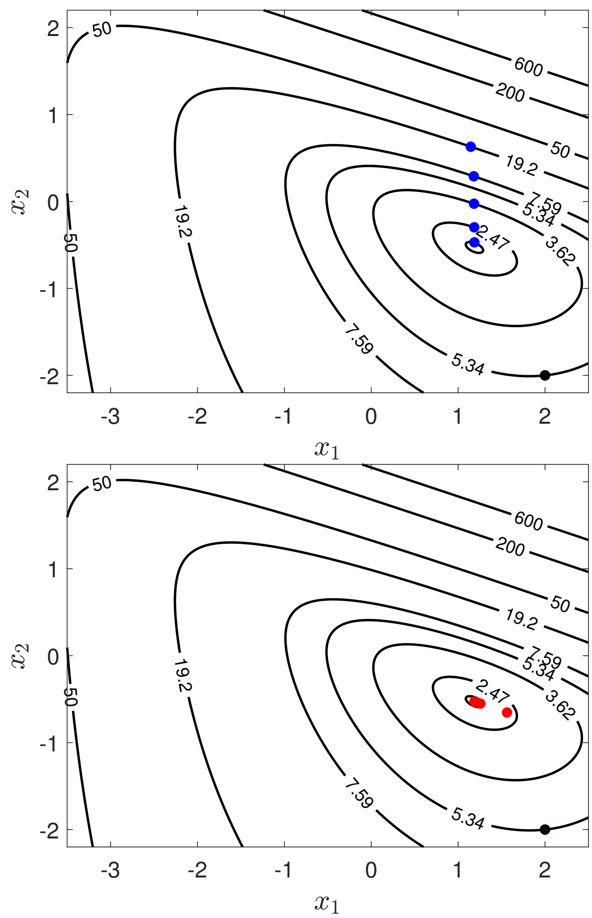
dokładność rozwiązania $\epsilon =$ `1e-4`. W procedurze *backtracking line search* przyjąć $\alpha = 0.5$ oraz $\beta = 0.5$. Wygenerować wykres poziomic i kolejnych punktów iteracyjnych tak jak na Rys. 2, skorzystać w tym celu z funkcji `meshgrid`, `arrayfun` oraz `contour` środowiska Matlab. Dla porównania końcowego wyniku rozwiązać to samo zadanie korzystając z (a) pakietu `CVX` (b) funkcji `fminsearch` środowiska Matlab.

Wskazówka 1: Gradient funkcji (14) jest postaci

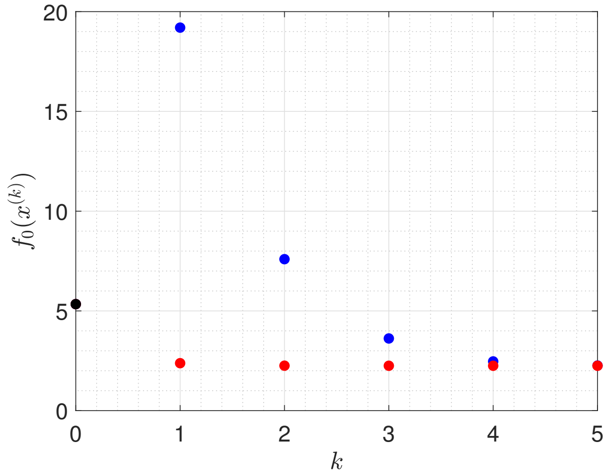
$$\nabla f_0(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} - \mathrm{e}^{-x_1-0.1} \\ 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \end{bmatrix} + 2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_\mathrm{c}). \quad (17)$$

Hesjan funkcji (14) jest postaci

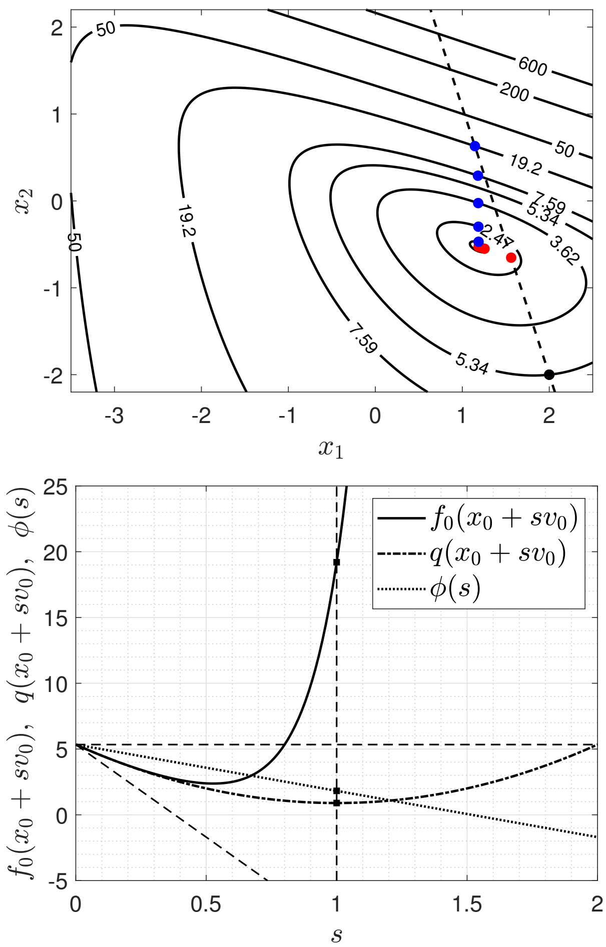
$$\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} + \mathrm{e}^{-x_1-0.1} & 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \\ 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} & 9\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \end{bmatrix} + 2\boldsymbol{P}. \quad (18)$$



Rysunek 2: Poziomice funkcji celu $f_0(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} + \mathrm{e}^{-x_1-0.1} + (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_\mathrm{c})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_\mathrm{c})$ wraz z kolejnymi iteracjami dla punktu startowego $\boldsymbol{x}_0 = [2,\ -2]^{\mathrm{T}}$. Górny panel – klasyczna metoda Newtona. Dolny panel – metoda Newtona z tłumieniem.



Rysunek 3: Wartości funkcji celu $f_0(\boldsymbol{x}_k)$ dla $k = 0, 1, \ldots$. Wartość $k = 0$ odpowiada punktowi startowemu. Kolor niebieski – metoda Newtona, kolor czerwony – metoda Newtona z tłumieniem.



Rysunek 4: Schemat metody *backtracking line search* w pierwszej iteracji dla $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.5$. Panel górny – linia przekroju. Panel dolny – płaszczyzna przekroju. Funkcja q jest przybliżeniem kwadratowym funkcji celu f_0 w punkcie $\boldsymbol{x}_0$, tzn. $q(\boldsymbol{x}_0 + s\boldsymbol{v}_0) = f_0(\boldsymbol{x}_0) + s\,[\nabla f_0(\boldsymbol{x}_0)]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_0 + \frac{s^2}{2}\boldsymbol{v}_0^{\mathrm{T}}\left[\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}_0)\right]\boldsymbol{v}_0$. Funkcja ϕ jest określona wzorem $\phi(s) = f_0(\boldsymbol{x}_0) + \alpha s\,[\nabla f_0(\boldsymbol{x}_0)]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_0$.

Zadanie 2. Napisać skrypt w środowisku Matlab do szukania minimum funkcji metodą Newtona z tłumieniem. Zakładamy, że znana z góry funkcja $f_0 : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ jest postaci

$$f_0(\boldsymbol{x}) = t\left[\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} + \mathrm{e}^{-x_1-0.1}\right] - \log\left[1 - (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})\right] \tag{19}$$

gdzie $\boldsymbol{P}$ i $\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}}$ są dane wzorem (15). Jako punkt startowy przyjąć

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}, \tag{20}$$

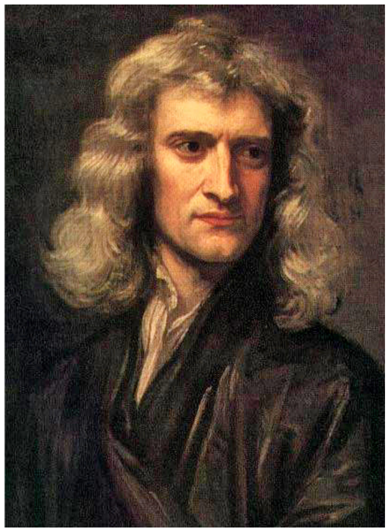
dokładność rozwiązania $\epsilon =$ `1e-4`. Wartość parametru t przyjąć, kolejno, $t = 0.1$, $t = 1.0$ i $t = 10.0$. W procedurze *backtracking line search* przyjąć $\alpha = 0.3$ oraz $\beta = 0.8$. Dla porównania końcowego wyniku rozwiązać to samo zadanie korzystając z (a) pakietu `CVX` (b) funkcji `fminsearch` środowiska Matlab.

Wskazówka 1: Gradient funkcji (14) jest postaci

$$\nabla f_0(\boldsymbol{x}) = t\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} - \mathrm{e}^{-x_1-0.1} \\ 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \end{bmatrix} + \frac{2\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})}{1-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})}. \tag{21}$$

Hesjan funkcji (14) jest postaci

$$\nabla^2 f_0(\boldsymbol{x}) = t\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} + \mathrm{e}^{-x_1-0.1} & 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \\ 3\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} & 9\mathrm{e}^{x_1+3x_2-0.1} \end{bmatrix} + \frac{4\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}}{\left[1-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})\right]^2} + \frac{2\boldsymbol{P}}{1-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}})}. \tag{22}$$



Rysunek 5: Sir Isaac Newton (1642 – 1726) was an English mathematician, physicist, astronomer, theologian, and author (...) who is widely recognised as one of the most influential scientists of all time, and a key figure in the scientific revolution. His book Philosophia Naturalis Principia Mathematica (*Mathematical Principles of Natural Philosophy*), first published in 1687, laid the foundations of classical mechanics. [`https://en.wikipedia.org/wiki/Isaac_Newton`]

Literatura

[1] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2004. `http://web.stanford.edu/~boyd/cvxbook/`.