Matematické programování

Lukšan, Ladislav
2008

Institute of Computer Science
Academy of Sciences of the Czech Republic

Matematické programování

Ladislav Lukšan

Technical report No. 1043

Prosinec 2008

Pod Vodárenskou věží 2, 182 07 Prague 8 phone: +420 2 688 42 44, fax: +420 2 858 57 89,
e-mail:e-mail:ics@cs.cas.cz

Institute of Computer Science
Academy of Sciences of the Czech Republic

Matematické programování

Ladislav Lukšan [1]

Technical report No. 1043

Prosinec 2008

Abstrakt:

Tato zpráva obsahuje učební text pro předmět matematické programování na fakultě mechatroniky Technické university v Liberci.

Keywords:
Matematické programování, numerická optimalizace, nelineární aproximace, systémy nelineárních rovnic, algoritmy.

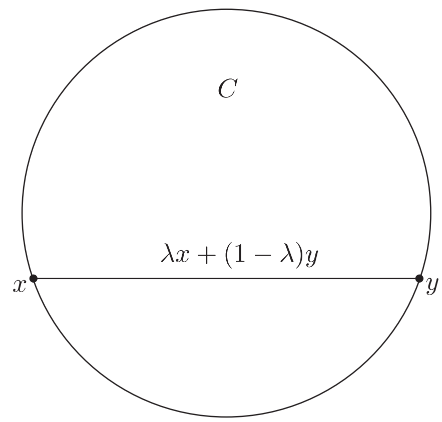
[1] This work was supported by the Grant Agency of the Czech Academy of Sciences, project code IAA1030405. L.Lukšan is also from Technical University of Liberec, Hálkova 6, 461 17 Liberec.

Konvexní množiny

Definice 1 *Řekněme, že množina $C \in R^n$ je konvexní, jestliže z $x \in C$, $y \in C$ plyne*

$$\lambda x + (1-\lambda)y \in C,$$

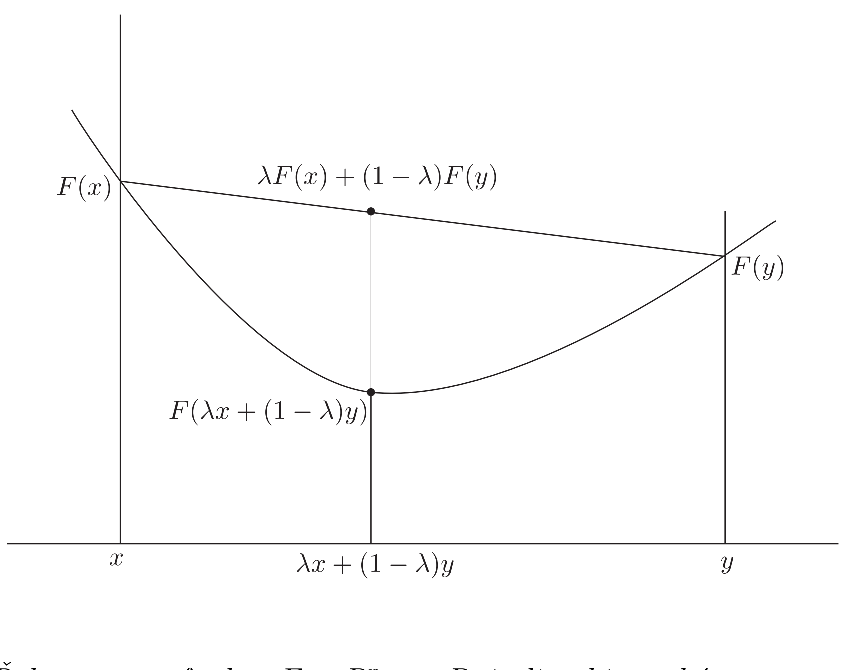
pokud $0 \le \lambda \le 1$.



Definice 2 *Řekneme, že funkce $F : R^n \to R$ je konvexní na konvexní množině $C \subset R^n$, jestliže platí*

$$F(\lambda x + (1-\lambda)y) \le \lambda F(x) + (1-\lambda)F(y),$$

pokud $x \in C$, $y \in C$ a $0 \le \lambda \le 1$.



Definice 3 *Řekneme, že funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská na množině $C \subset R^n$, jestliže platí*

$$|F(y) - F(x)| \le L\|y - x\|,$$

pokud $x \in C$, $y \in C$.

Poznámka 1 Vztahy z definic 1 a 2 můžeme zapsat ve tvaru

$$y + \lambda(x - y) \in C \quad \text{a} \quad F(y + \lambda(x - y)) \leq F(y) + \lambda(F(x) - F(y)),$$

$$x + \lambda(y - x) \in C \quad \text{a} \quad F(x + \lambda(y - x)) \leq F(x) + \lambda(F(y) - F(x)).$$

Příklad 1

$$\begin{aligned}
F(x) &= \sum_i |x_i| \\
F(\lambda x + (1-\lambda)y) &= \sum_i |\lambda x_i + (1-\lambda)y_i| = \\
&\leq \sum_i |\lambda x_i| + \sum_i |(1-\lambda)y_i| = \\
&= \lambda \sum_i |x_i| + (1-\lambda)\sum_i |y_i| = \\
&= \lambda F(x) + (1-\lambda)F(y)
\end{aligned}$$

Příklad 2

$$\begin{aligned}
F(x) &= \max_i |x_i| \\
F(\lambda x + (1-\lambda)y) &= \max_i |\lambda x_i + (1-\lambda)y_i| \\
&\leq \max_i (|\lambda x_i| + |(1-\lambda)y_i| \leq \\
&\leq \max_i |\lambda x_i| + \max_i |(1-\lambda)y_i| = \\
&= \lambda \max_i |x_i| + (1-\lambda)\max_i |y_i| = \\
&= \lambda F(x) + (1-\lambda)F(y)
\end{aligned}$$

Příklad 3

$$C = \{x \in R_n : F(x) \leq a\}$$

F – konvexní $\quad \Rightarrow \quad$ C – konvexní

$$\begin{aligned}
&F(x) \leq a \\
&F(y) \leq a \\
&F(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda F(x) + (1-\lambda)F(y) \leq \lambda a + (1-\lambda)a = a
\end{aligned}$$

Příklad 4 Množiny

$$C_1 = \{x \in R_n : \sum_i |x_i| \leq 1\}$$

$$C_2 = \{x \in R_n : \max_i |x_i| \leq 1\}$$

jsou konvexní

Definice 4 *Nechť $m \geq 1$, $x_i \in R^n$, $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$, $\lambda_1 + \ldots + \lambda_m = 1$. Pak bod*

$$x = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i,$$

nazveme konvexní kombinací bodů $x_i \in R^n$, $1 \leq i \leq m$.

Věta 1 *Množina $C \subset R^n$ je konvexní právě tehdy, obsahuje-li všechny konvexní kombinace svých bodů.*

Poznámka 2 Konvexní kombinace konvexních kombinací je opět konvexní kombinací.

Poznámka 3 Nechť $x_i \in R^n$, $1 \leq i \leq m$, a $x = \sum_{i=1}^m \lambda_i x_i$. Pak bod x nazveme:

(a) Lineární kombinací bodů $x_i \in R^n$, jsou-li koeficienty $\lambda_i \in R$ libovolné.

(b) Nezápornou lineární kombinací bodů $x_i \in R^n$, platí-li $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$.

(c) Afinní kombinací bodů $x_i \in R^n$, platí-li $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$.

(d) Konvexní kombinací bodů $x_i \in R^n$, platí-li $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$ a $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$.

Tyto kombinace definují po řadě (a) lineární podprostory, (b) konvexní kužely, (c) afinní množiny a (d) konvexní množiny. Všechny uvedené množiny jsou konvexní. Afinní množina je posunutým lineárním podprostorem. Lze tedy definovat dimenzi afinní množiny jako dimenzi odpovídajícího lineárního podprostoru a jelikož konvexní množinu lze vnořit do afinní množiny (vynecháním omezení $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$) i dimenzi konvexní množiny.

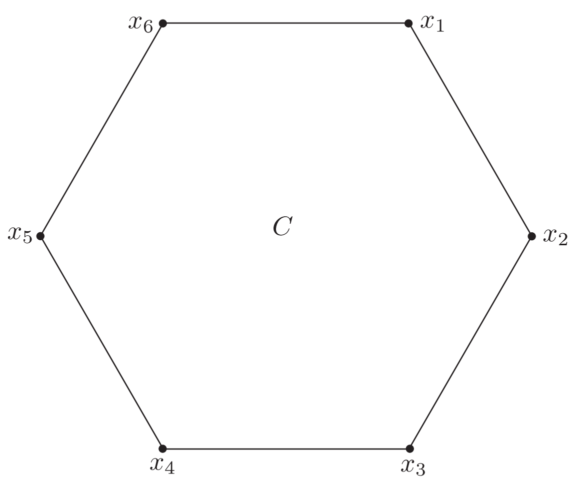
Věta 2 *Průnik konvexních množin je konvexní množinou.*

Věta 3 *Lineární kombinace konvexních množin je konvexní množinou.*

Definice 5 *Konvexním obalem množiny $C \subset R^n$ nazveme průnik*

$$\operatorname{conv} C = \bigcap_{\alpha} C_\alpha$$

všech konvexních množin $C_\alpha \subset R^n$ obsahujících C.



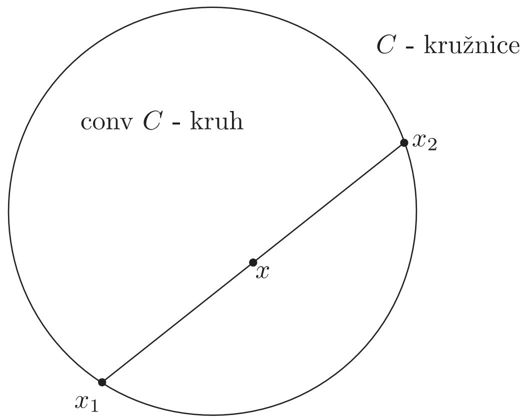
$C = \operatorname{conv}\{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6\}$

Poznámka 4 Zřejmě platí $C \subset \operatorname{conv} C$.

Věta 4 *Konvexní obal množiny $C \subset R^n$ je množina všech konvexních kombinací bodů z C, tedy všech bodů tvaru*

$$y = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i x_i,$$

kde $m \geq 1$, $x_i \in C$, $\lambda_i \geq 0$, $1 \leq i \leq m$, $\lambda_1 + \ldots + \lambda_m = 1$.



Věta 5 *(Caratheodory) Nechť $y \in \operatorname{conv} C$, kde $C \subset R^n$. Pak existuje $n+1$ bodů $x_i \in C$, $1 \leq i \leq n+1$, takových, že y je jejich konvexní kombinací.*

Věta 6 *Je-li množina C uzavřená, je i množina* conv C *uzavřená.*

Poznámka 5 Z věty 4 plyne, že je-li množina C omezená, je i množina conv C omezená. To spolu s větou 6 ukazuje, že je-li množina C kompaktní, je i množina conv C kompaktní.

Definice 6 *Nechť $C \subset R^n$. Pak funkci*

$$d_C(x) = \inf_{y \in C} \|y - x\|$$

nazveme vzdáleností bodu x od množiny C (nebo vzdálenostní funkcí množiny C).

Poznámka 6 Je-li množina $C \subset R^n$ uzavřená, platí

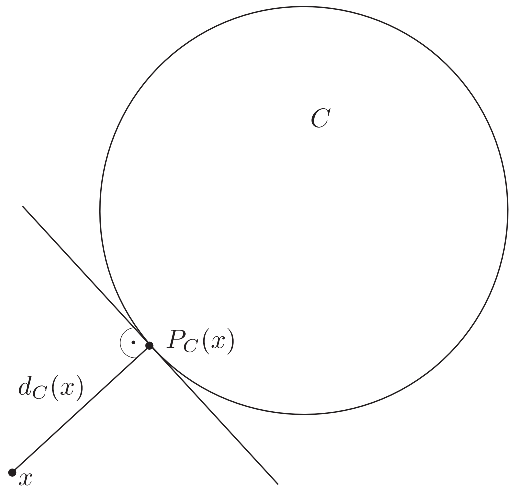
$$d_C(x) = \min_{y \in C} \|y - x\|.$$

V dalším výkladu se omezíme na uzavřené množiny i když většina tvrzení má obecnější charakter.

Věta 7 *Nechť množina $C \subset R^n$ je uzavřená. Pak vzdálenostní funkce d_C je lipschitzovská v R^n s koeficientem $L = 1$. Je-li C konvexní, je d_C konvexní v R^n a ke každému bodu $x \in R^n$ existuje právě jeden bod $y \in C$ takový, že*

$$\|y - x\| = d_C(x).$$

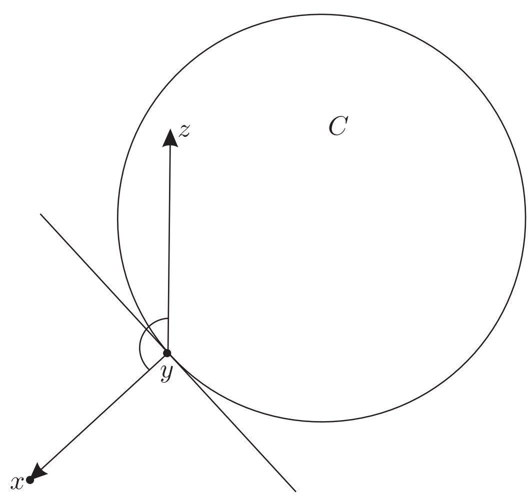
Definice 7 *Nechť* $C \subset R^n$ *je uzavřená konvexní množina,* $x \in R^n$ *a* $y \in C$ *je bod takový, že* $\|y - x\| = d_C(x)$*. Pak řekneme, že* y *je projekcí bodu* x *do množiny* C *a píšeme* $y = P_C(x)$*.*



Věta 8 *Nechť* $C \subset R^n$ *je uzavřená konvexní množina a* $x \notin C$*. Pak bod* $y = P_C(x)$ *je hraničním bodem množiny* C*.*

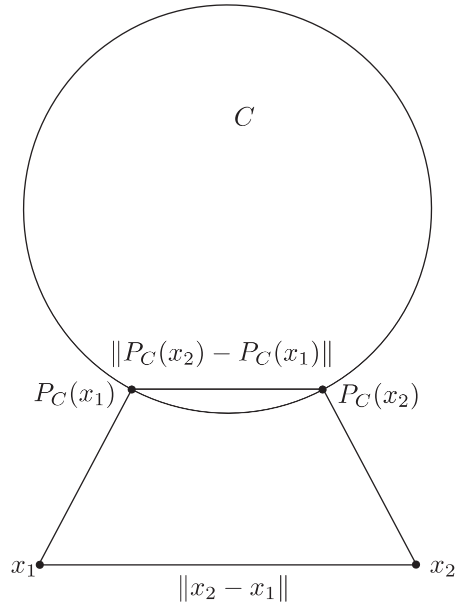
Lemma 1 *Nechť* $C \subset R^n$ *je uzavřená konvexní množina,* $x \in R^n$ *a* $y = P_C(x)$*. Pak platí*

$$(x - y)(z - y) \leq 0 \quad \forall z \in C$$



Věta 9 *Nechť* $C \subset R^n$ *je uzavřená konvexní množina. Pak*

$$\|P_C(x_2) - P_C(x_1)\| \leq \|x_2 - x_1\| \quad \forall x_1, x_2 \in R^n.$$



Definice 8 *Nechť $a \in R^n$ a $\alpha \in R$. Pak množinu*

$$H(a, \alpha) = \{y \in R^n : a^T y \leq \alpha\}$$

nazveme poloprostorem určeným normálovým vektorem a a číslem α.

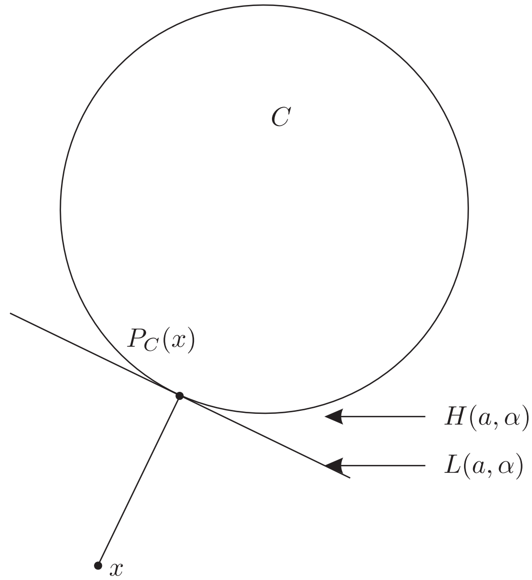
Poznámka 7 Hranicí poloprostoru $H(a, \alpha)$ je nadrovina

$$L(a, \alpha) = H(a, \alpha) \cap H(-a, \alpha) = \{y \in R^n : a^T y = \alpha\}.$$

Číslo α určuje vzdálenost nadroviny $L(a, \alpha)$ od počátku. Tato vzdálenost se rovná podílu $\alpha/\|a\|$. Odtud plyne, že bod $y = 0$ je hraničním bodem poloprostoru $H(a, \alpha)$ (leží v hraniční nadrovině $L(a, \alpha)$) právě tehdy, když $\alpha = 0$.

Věta 10 *Poloprostor $H(a, \alpha)$ je uzavřenou konvexní množinou.*

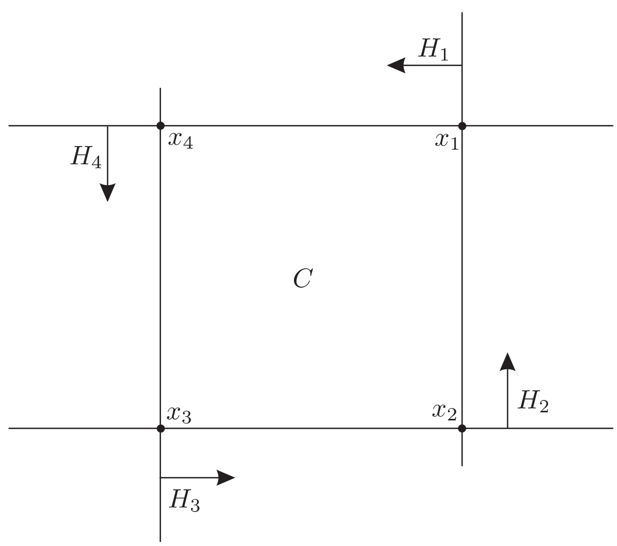
Věta 11 *Nechť C je uzavřená konvexní množina a nechť $x \notin C$. Pak existuje poloprostor $H(a, \alpha)$ takový, že $C \subset H(a, \alpha)$ a $x \notin H(a, \alpha)$. Tento poloprostor lze volit tak, že platí $a = x - P_C(x)$ a $\alpha = (x - P_C(x))^T P_C(x)$. Pak $P_C(x) \in L(a, \alpha)$, takže $C \cap L(a, \alpha) \neq \emptyset$.*



Důsledek 1 *Nechť C_1, C_2 jsou uzavřené konvexní množiny takové, že $C_1 \cap C_2 = \emptyset$. Pak existuje poloprostor $H(a,\alpha)$ takový, že $C_1 \subset H(a,\alpha)$ a $C_2 \cap H(a,\alpha) = \emptyset$*

Věta 12 *Uzavřená konvexní množina $C \subset R^n$ je průnikem všech poloprostorů obsahujících C.*

Definice 9 *Konvexní množina, která je průnikem konečného počtu poloprostorů, se nazývá polyedrální množinou.*



$C = H_1 \cap H_2 \cap H_3 \cap H_4$

Definice 10 *Nechť C je uzavřená konvexní množina a $H(a,\alpha)$ je poloprostor s hranicí $L(a,\alpha)$ takový, že $C \subset H(a,\alpha)$ a $C \cap L(a,\alpha) \neq \emptyset$. Pak řekneme, že $H(a,\alpha)$ je tečným poloprostorem a $L(a,\alpha)$ tečnou nadrovinou množiny C.*

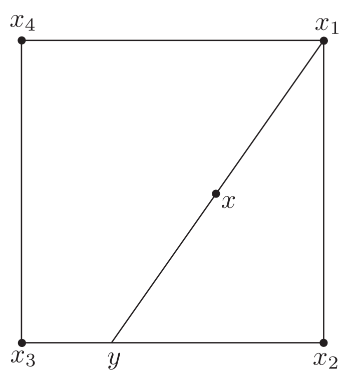
Poznámka 8 Ve Větě 12 se můžeme omezit na tečné poloprostory (uzavřená konvexní množina je průnikem svých tečných poloprostorů). Obsahuje-li poloprostor $H(a, \alpha)$ konvexní množinu C, přižemž $C \cap L(a, \alpha) = \emptyset$, lze volbou $\alpha' = \max_{y \in C} a^T y$ docílit toho, že $C \subset H(a, \alpha') \subset H(a, \alpha)$ a $C \cap L(a, \alpha') \neq \emptyset$.

Věta 13 *Nechť bod $y \in R^n$ je hraničním bodem uzavřené konvexní množiny C. Pak existuje tečná nadrovina $L(a, \alpha)$ taková, že $y \in L(a, \alpha)$.*

Definice 11 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Není-li bod x konvexní kombinací žádných bodů z C různých od x, řekneme, že x je krajním bodem nebo vrcholem množiny C.*

Poznámka 9 V definici krajních bodů se můžeme omezit na konvexní kombinace dvou bodů z C různých od x. Dále se můžeme omezit na průměry dvou bodů z C různých od x. Nechť $x = \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2$, $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq 0$. Položíme-li $x_3 = \lambda_1' x_1 + \lambda_2' x_2$, kde $\lambda_1' = 2\lambda_1 - 1$, $\lambda_2' = 2\lambda_2$, takže $\lambda_1' + \lambda_2' = 1$, $\lambda_1' \geq 0$, $\lambda_2' \geq 0$, platí $x_3 \in C$ a $x = (x_1 + x_3)/2$.

Věta 14 *Kompaktní konvexní množina je konvexním obalem svých krajních bodů.*



$x = \lambda_1 x_1 + (1 - \lambda_1) y \qquad y = \lambda_2 x_2 + (1 - \lambda_2) x_3$

$x = \lambda_1' x_1 + \lambda_2' x_2 + \lambda_3' x_3$

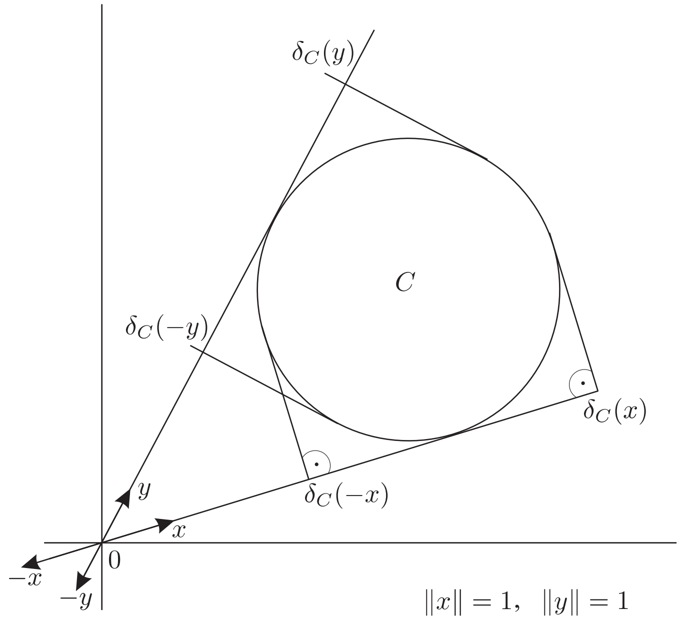
$\lambda_1' = \lambda_1 \geq 0\,, \quad \lambda_2' = (1 - \lambda_1)\lambda_2 \geq 0\,, \quad \lambda_3' = (1 - \lambda_1)(1 - \lambda_2) \geq 0$

$\lambda_1' + \lambda_2' + \lambda_3' = 1$

Definice 12 *Nechť $C \subset R^n$. Pak funkci*

$$\delta_C(x) = \sup_{y \in C} y^T x$$

nazveme opěrnou funkcí množiny C.



Poznámka 10 Nechť množina $C \subset R^n$ je kompaktní. Pak platí

$$\delta_C(x) = \max_{y \in C} y^T x.$$

V dalším výkladu se omezíme na kompaktní množiny i když většina tvrzení má obecnější charakter.

Věta 15 *Nechť množina $C \subset R^n$ je kompaktní. Pak opěrná funkce δ_C je pozitivně homogenní, subaditivní a lipschitzovská v R_n.*

Věta 16 *Nechť množina $C \subset R^n$ je kompaktní. Pak*

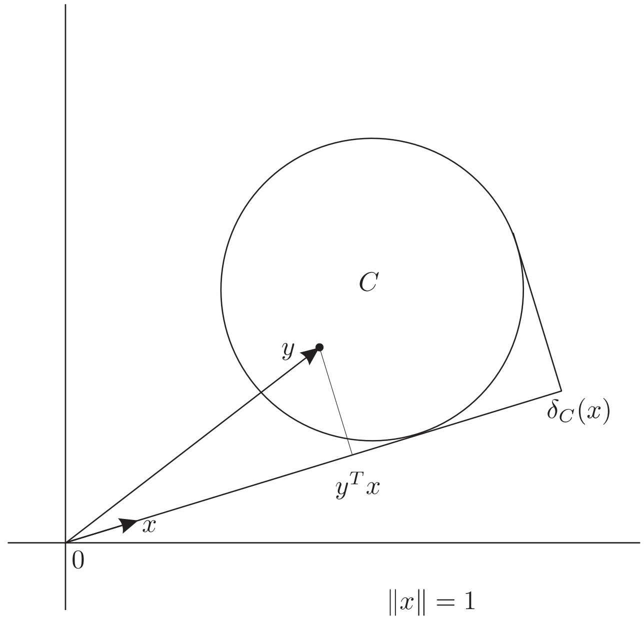
$$\delta_C(x) = \delta_{\mathrm{conv}\, C}(x) \quad \forall x \in R^n.$$

Věta 17 *Nechť množiny $C_1 \subset R^n$, $C_2 \subset R^n$ jsou konvexní a kompaktní. Pak $C_1 \subset C_2$ platí právě tehdy, jestliže*

$$\delta_{C_1}(x) \leq \delta_{C_2}(x) \quad \forall x \in R^n.$$

Důsledek 2 *Nechť množina $C \subset R^n$ je konvexní a kompaktní. Pak $y \in C$ právě tehdy, jestliže*

$$y^T x \leq \delta_C(x) \quad \forall x \in R^n.$$



Věta 18 *Nechť množiny $C_1 \subset R^n$, $C_2 \subset R^n$ jsou kompaktní. Pak*

$$\delta_{C_1+C_2}(x) = \delta_{C_1}(x) + \delta_{C_2}(x).$$

Opěrná funkce množiny $C \subset R^n$ má bezprostřední vztah k poloprostorům obsahujícím tuto množinu.

Věta 19 *Množina $C \subset R^n$ leží v poloprostoru $H(a, \alpha)$ právě tehdy jestliže $\alpha \geq \delta_C(a)$, přičemž $H(a, \alpha)$ je tečným poloprostorem množiny C právě tehdy, jestliže $\alpha = \delta_C(a)$.*

Definice 13 *Řekneme, že množina $K \subset R^n$ je kuželem, jestliže z $x \in K$ a $\lambda \geq 0$ plyne $\lambda x \in K$.*

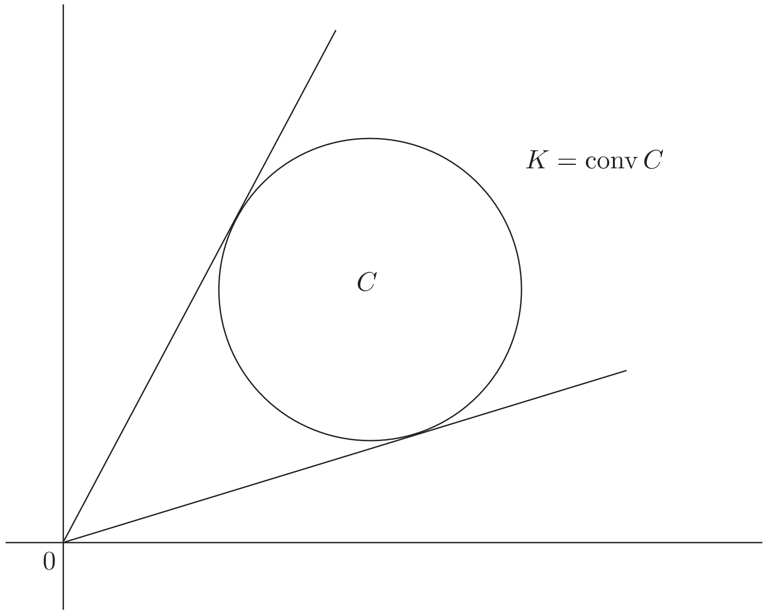
Věta 20 *Průnik kuželů je kuželem.*

Věta 21 *Lineární kombinace kuželů je kuželem.*

Definice 14 *Kuželovým obalem množiny $C \subset R^n$ nazveme průnik*

$$\text{cone } C = \bigcap_{\alpha} K_\alpha$$

všech kuželů $K_\alpha \subset R^n$ obsahujících C.



Věta 22 *Nechť $C \subset R^n$. Pak platí*

$$\text{cone } C = \bigcup_{\lambda \geq 0} \lambda C = \{x \in R^n : \ x = \lambda y, \ \ y \in C, \ \ \lambda \geq 0\}$$

Kužel cone C *je tedy množinou všech nezáporných násobků bodů z* C.

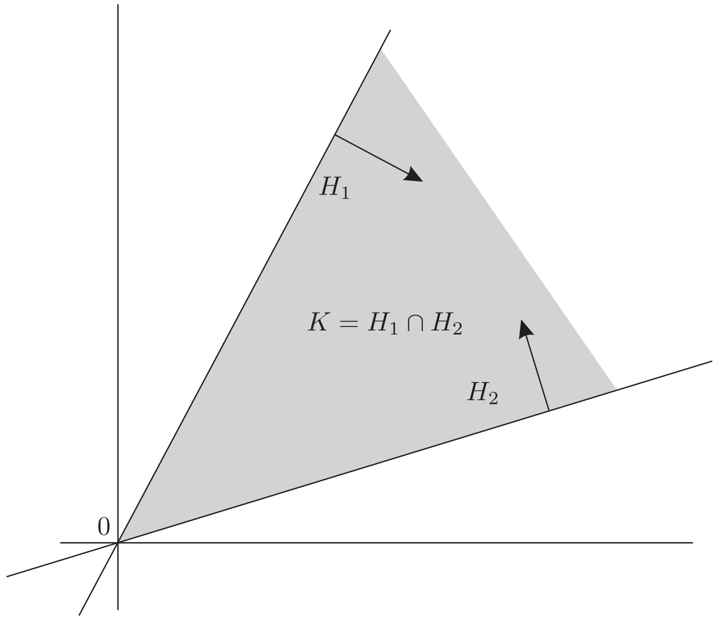
Věta 23 *Množina $K \subset R^n$ je konvexním kuželem právě tehdy, obsahuje-li všechny nezáporné lineární kombinace svých bodů.*

Důsledek 3 *Množina $K \subset R^n$ je konvexním kuželem právě tehdy, obsahuje-li nezáporné násobky a součty svých bodů.*

Věta 24 *Množina* cone (conv C) *je množinou všech nezáporných lineárních kombinací bodů z* C.

Jelikož uzavřený konvexní kužel je uzavřenou konvexní množinou, můžeme studovat tečné poloprostory uzavřených konvexních kuželů.

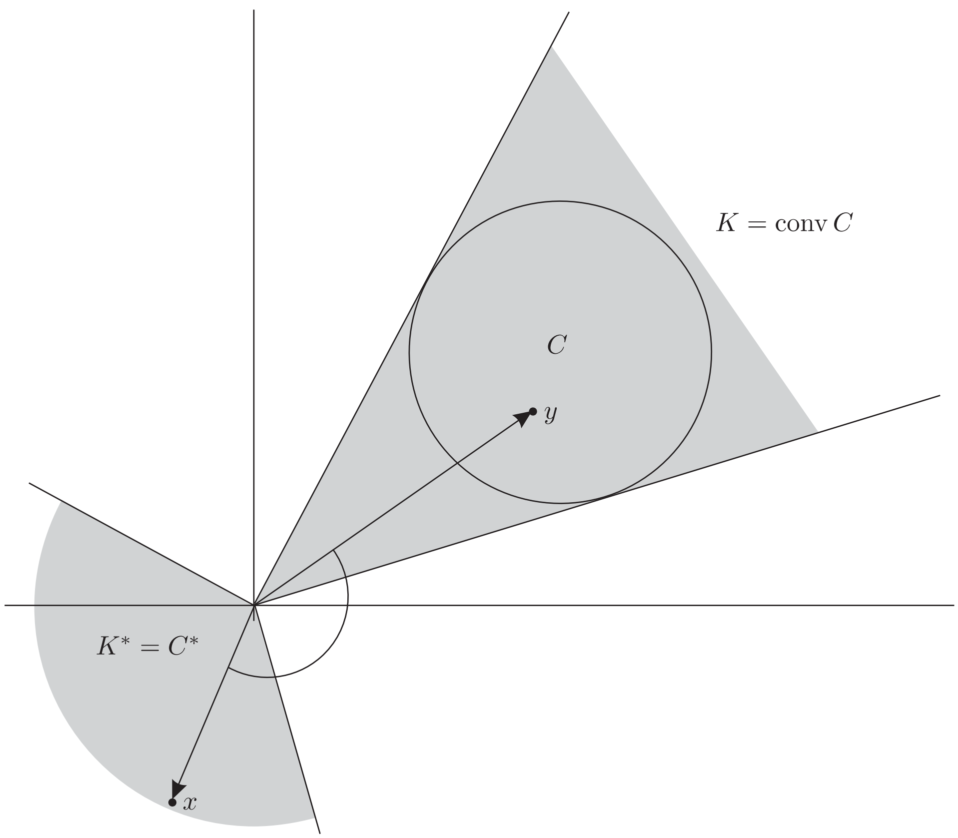
Věta 25 *Tečný poloprostor uzavřeného konvexního kuželu je uzavřeným konvexním kuželem (takže obsahuje počátek souřadnic). Uzavřený konvexní kužel je průnikem svých tečných poloprostorů.*



Definice 15 *Nechť $C \in R^n$. Množinu*

$$C^* = \{x \in R^n : y^T x \leq 0 \quad \forall y \in C\}$$

nazveme polárním kuželem množiny C.



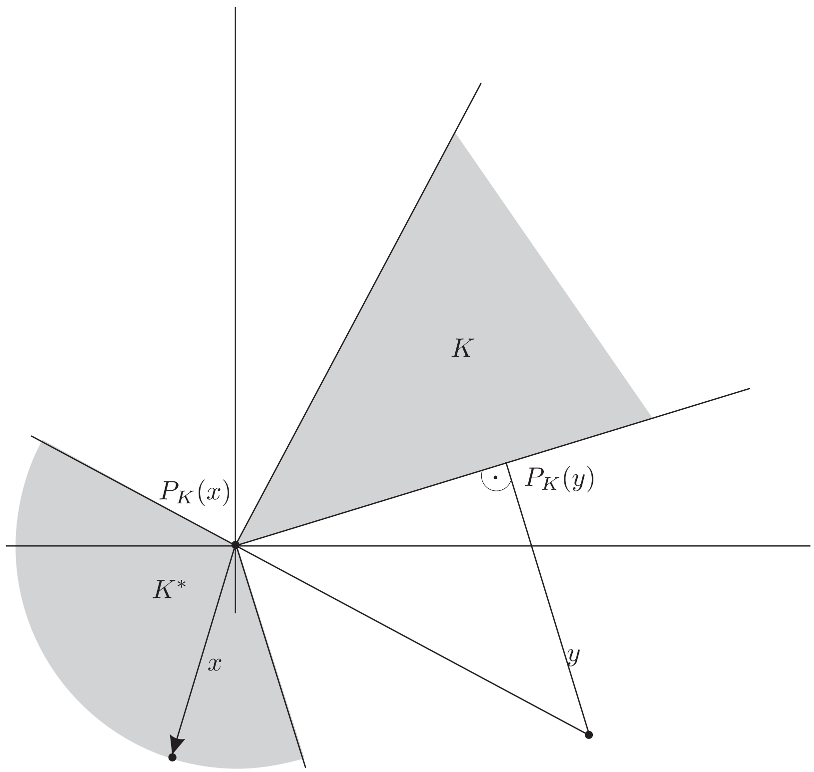
Poznámka 11 Z definice 15 lze snadno usoudit, že z $C_1 \subset C_2$ plyne $C_2^* \subset C_1^*$.

Věta 26 *Nechť $C \subset R^n$. Pak množina C^* je uzavřeným konvexním kuželem.*

Věta 27 *Je-li $K \subset R^n$ uzavřeným konvexním kuželem, platí $(K^*)^* = K$.*

Věta 28 *Nechť $K \subset R^n$ je uzavřený konvexní kužel. Pak*

$$K^* = \{x \in R^n : P_K(x) = 0\}.$$



Věta 29 *Nechť $K \subset R^n$ je uzavřený konvexní kužel. Pak K^* je sjednocením normálových vektorů tečných poloprostorů kuželu K, neboli*

$$K^* = \bigcup_{K \subset H(a,0)} a.$$

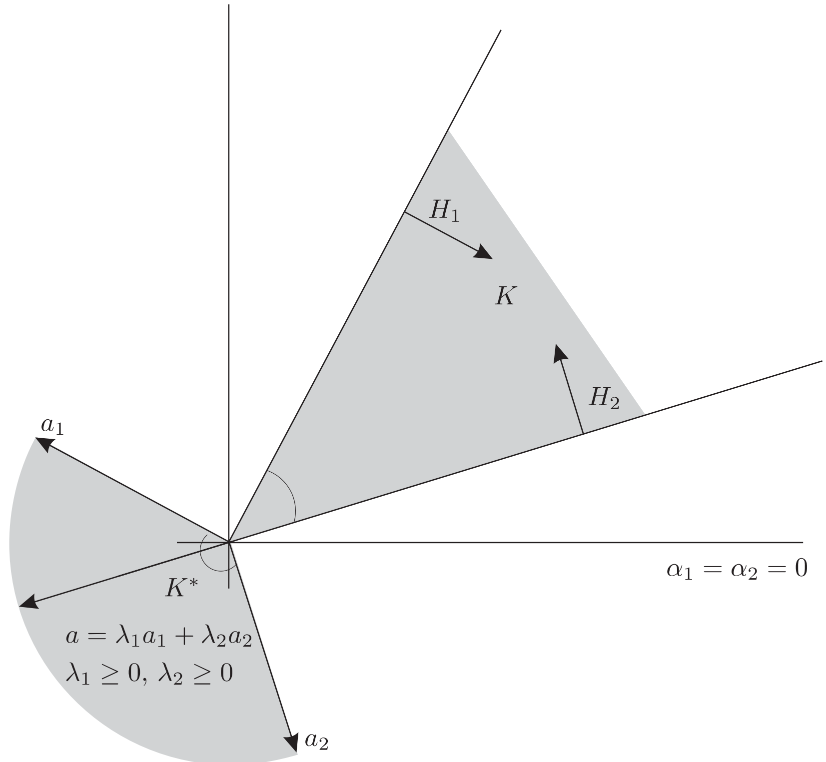
Definice 16 *Kužel $K \subset R^n$, který je průnikem konečného počtu tečných poloprostorů, se nazývá polyedrálním kuželem*

Věta 30 *Nechť $K \in R^n$ je polyedrální kužel takový, že*

$$K = \bigcap_{i=1}^{m} H(a_i, 0)$$

Pak

$$K^* = \text{cone}\,(\text{conv}\,\{a_i : 1 \leq i \leq m\}).$$



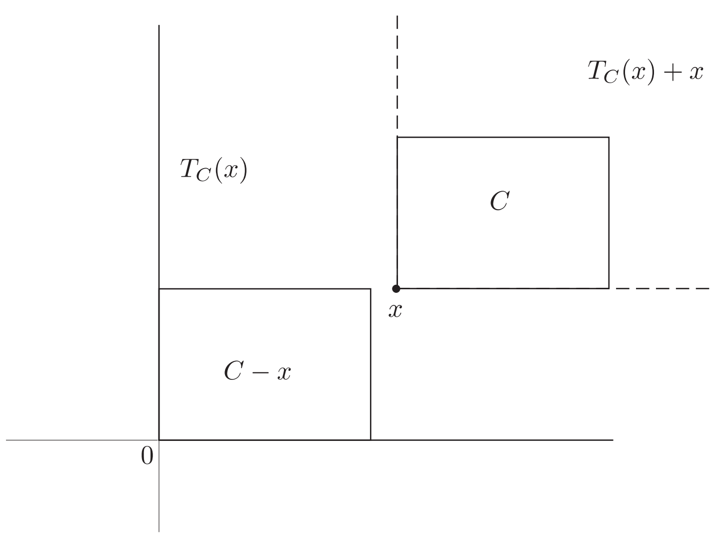
Definice 17 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená množina a $x \in C$. Tečným kuželem množiny C v bodě x nazveme množinu*

$$T_C(x) = \{y \in R^n : \text{ existují posloupnosti } y_i \to y,\ t_i \downarrow 0 \text{ takové, že } x + t_i y_i \in C\}$$

Věta 31 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená množina a $x \in C$. Pak $T_C(x)$ je uzavřeným kuželem. Je-li C konvexní, je i $T_C(x)$ konvexní.*

Věta 32 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Pak*

$$T_C(x) = \overline{\bigcup_{\lambda \geq 0} \lambda(C - x)}$$



Věta 33 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$ je jejím hraničním bodem. Pak $T_C(x)$ je průnikem všech tečných poloprostorů množiny $C - x$ obsahujících počátek souřadnic, neboli*

$$T_C(x) = \bigcap_{C-x \subset H(a,0)} H(a,0).$$

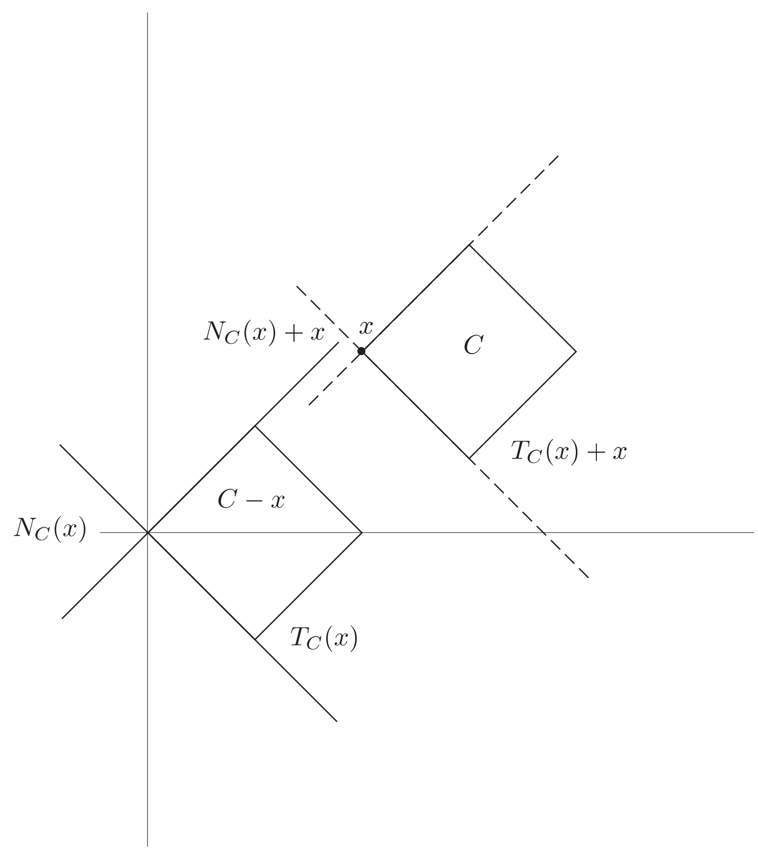
Je-li množina $C \in R^n$ polyedrální, je i tečný kužel $T_C(x)$ polyedrální a existují tečné poloprostory $H(a_i, 0)$, $1 \le i \le m$, takové, že

$$T_C(x) = \bigcap_{i=1}^{m} H(a_i, 0).$$

Definice 18 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Normálovým kuželem množiny C v bodě x nazveme množinu*

$$N_C(x) = T_C^*(x),$$

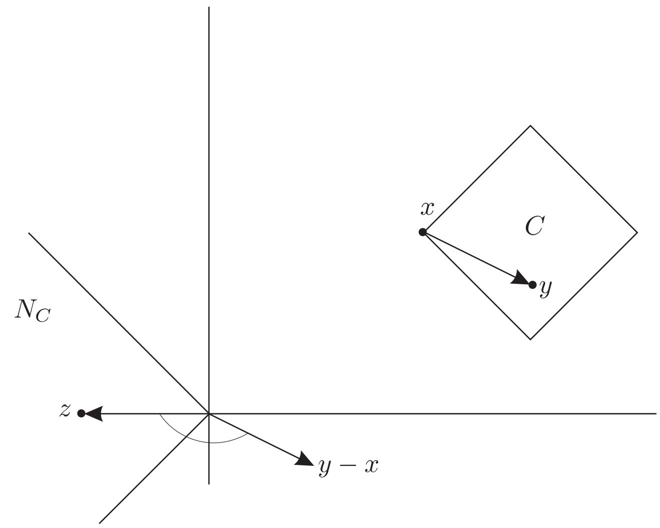
kde $T_C^*(x)$ je polární kužel tečného kuželu $T_C(x)$.



Poznámka 12 Podle Věty 26 je množina $N_C(x)$ uzavřeným konvexním kuželem.

Věta 34 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Pak*

$$N_C(x) = \{z \in R^n : (y - x)^T z \le 0 \quad \forall y \in C\}.$$



Věta 35 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$ je jejím hraničním bodem. Pak $N_C(x)$ je sjednocením normálových vektorů tečných poloprostorů množiny $C - x$ obsahujících počátek souřadnic, neboli*

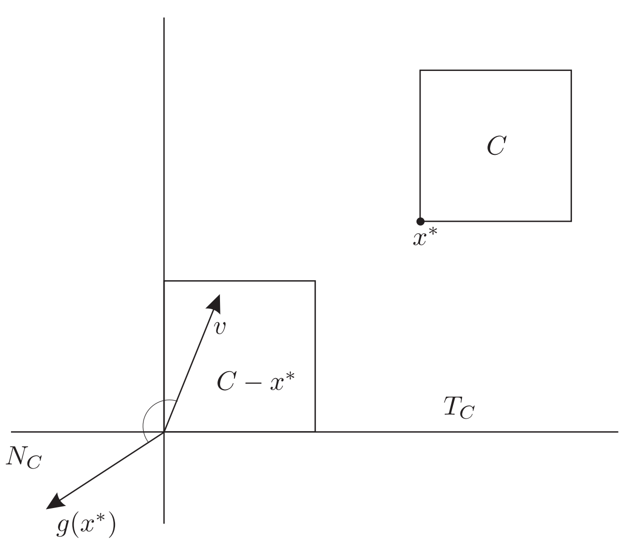
$$N_C(x) = \bigcup_{C - x \subset H(a,0)} a.$$

Je-li množina $C \subset R^n$ polyedrální, je i normálový kužel $T_C(x)$ polyedrální a existují tečné poloprostory $H(a_i, 0)$, $1 \leq i \leq m$, takové, že

$$N_C(x) = \text{cone}\,(\text{conv}\,\{a_i : 1 \leq i \leq m\}).$$

Věta 36 *Nechť $F \in C^1 : R^n \to R$ (spojitě diferencovaná) $C \subset R^n$ a $x^* \in C$. Pak je-li x^* lokálním minimem funkce F na C, platí*

$$-g(x^*) \in N_C(x^*)$$



Věta 37 *Nechť jsou splněny předpoklady Věty 36 a*

$$C = \{x \in R^n : c_i(x) \le 0,\ i \in I\}$$

kde $c_i : R^n \to R$, $i \in I$, *jsou konvexní funkce (takže* $C \in R^n$ *je konvexní množina). Nechť* $x^* \in C$ *a* $\overline{I} = \{i \in I : c_i(x^*) = 0\} \subset I$. *Pak*

$$T_C(x^*) = \{s \in R^n : a_i^T s \le 0,\ i \in \overline{I}\}$$

a

$$N_C(x^*) = \left\{ v \in R^n : v = \sum_{i \in \overline{I}} u_i a_i,\ u_i \ge 0 \right\} = \text{cone}\,(\text{conv}\,\{a_i : i \in \overline{I}\})$$

kde $a_i = \nabla c_i(x^*)$.

Konvexní funkce

Definice 19 *Řekneme, že funkce* $F : R^n \to R$ *je konvexní v okolí bodu* $x \in R^n$, *jestliže existuje číslo* $\varepsilon > 0$ *takové, že* F *je definovaná a konvexní v* $B(x, \varepsilon) = \{y : \|y - x\| < \varepsilon\}$, *neboli*

$$F(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2) \le \lambda F(x_1) + (1-\lambda)F(x_2),$$

pokud $x_1 \in B(x, \varepsilon)$, $x_2 \in B(x, \varepsilon)$ *a* $0 \le \lambda \le 1$.

Poznámka 13 Indukcí snadno dokážeme, že z $x_i \in B(x, \varepsilon)$, $\lambda_i \ge 0$ a $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$ plyne

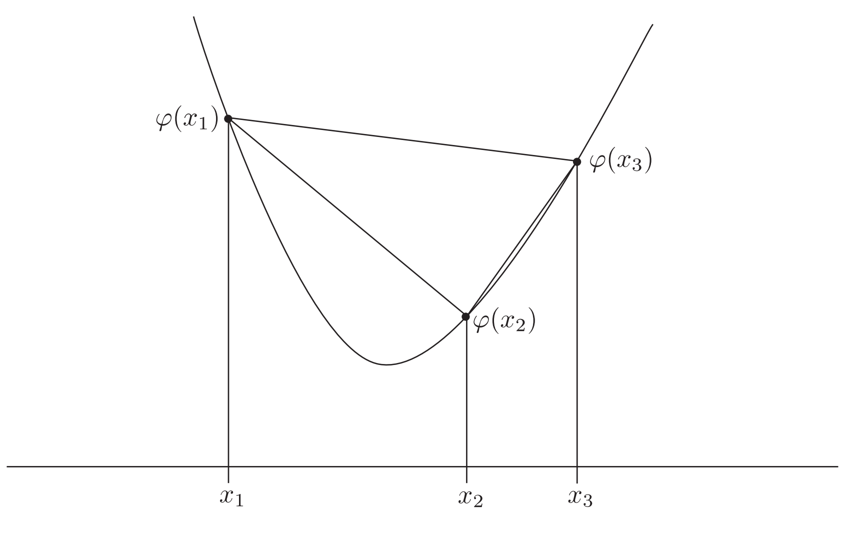
$$F\left(\sum_{i=1}^m \lambda_i x_i\right) \le \sum_{i=1}^m \lambda_i F(x_i),$$

pokud F je konvexní na $B(x, \varepsilon)$.

Věta 38 *Nechť funkce* $F : R^n \to R$ *je konvexní v okolí bodu* $x \in R^n$. *Pak* F *je lipschitzovská v okolí bodu* x.

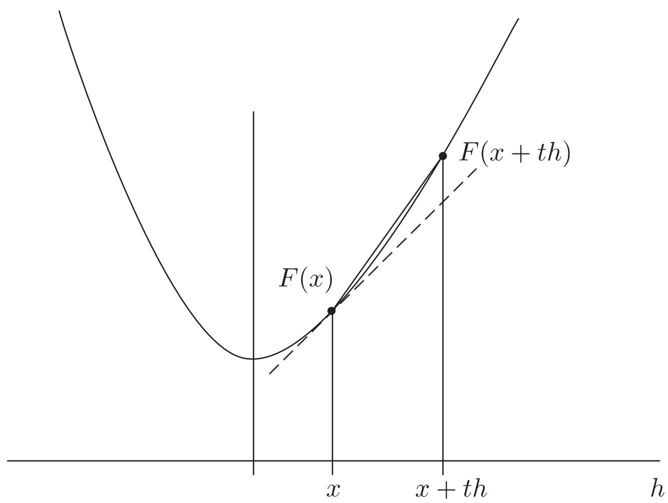
Lemma 2 *Nechť funkce* $\varphi : R \to R$ *je konvexní na intervalu* $[a, b]$ *a nechť* $a \le t_1 < t_2 < t_3 \le b$. *Pak platí*

$$\frac{\varphi(t_2) - \varphi(t_1)}{t_2 - t_1} \le \frac{\varphi(t_3) - \varphi(t_1)}{t_3 - t_1} \le \frac{\varphi(t_3) - \varphi(t_2)}{t_3 - t_2}.$$



Definice 20 *Řekneme, že funkce $F : R^n \to R$ má v bodě $x \in R^n$ směrovou derivaci ve směru $h \in R^n$, existuje-li konečná limita*

$$F'(x,h) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{F(x+th) - F(x)}{t}.$$



$$F(x,h) = \lim_{x \downarrow 0} \frac{F(x+th) - F(x)}{x}$$

Věta 39 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$ (takže je lipschitzovská s nějakou konstantou L v okolí tohoto bodu). Pak:*

(a) Směrová derivace $F'(x,h)$ existuje pro každé $h \in R^n$. Navíc existuje číslo $\varepsilon > 0$ takové, že

$$F'(x,h) = \inf_{0 < t\|h\| < \varepsilon} \frac{F(x+th) - F(x)}{t}.$$

(b) Funkce $F'(x,\cdot) : R^n \to R$ je pozitivně homogenní, subaditivní a lipschitzovská s konstantou L.

(c) Funkce $F'(\cdot,\cdot) : R^n \times R^n \to R$ je shora polospojitá, neboli

$$\limsup_{i \to \infty} F'(x_i, h_i) \le F'(x,h),$$

kdykoliv $x_i \to x$ a $h_i \to h$.

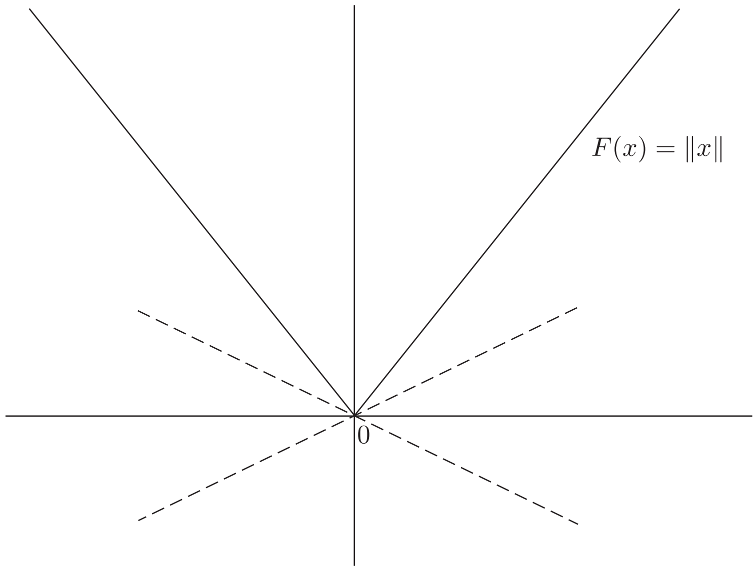
Poznámka 14 Podle Definice 20 platí $F'(x,0) = 0$, takže podle Věty 39 (b) dostaneme

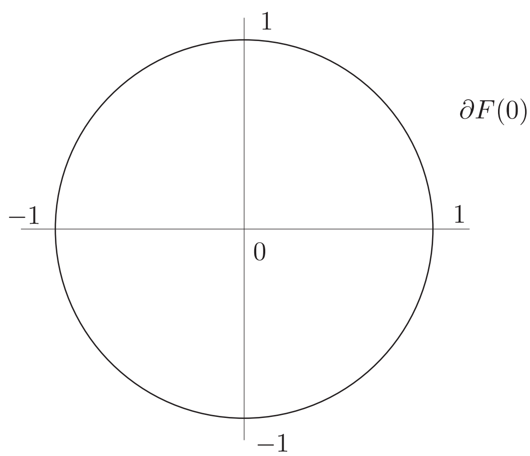
$$|F'(x,h)| = |F'(x,h) - F'(x,0)| \le L\|h\|.$$

Definice 21 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$. Pak množinu*

$$\partial F(x) = \left\{ g \in R^n : F'(x,h) \geq g^T h \;\; \forall h \in R^n \right\}$$

nazveme subdiferenciálem funkce F v bodě x. Elementy $g \in \partial F(x)$ budeme nazývat subgradienty funkce F v bodě x.





Věta 40 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$ (takže je v tomto okolí lipschitzovská s nějakou konstantou L). Pak:*

(a) Subdiferenciál $\partial F(x)$ je neprázdná konvexní kompaktní množina taková, že $\|g\| \leq L$ $\forall g \in \partial F(x)$.

(b) Pro libovolný vektor $h \in R^n$ platí

$$F'(x,h) = \max \left\{ g^T h : g \in \partial F(x) \right\}.$$

(c) Jestliže $x_i \to x$, $g_i \in \partial F(x_i)$ a $g_i \to g$, pak $g \in \partial F(x)$ (polospojitost shora).

(d) Existuje číslo $\varepsilon > 0$ takové, že pro libovolný vektor $g \in \partial F(x)$ platí

$$F(x+h) - F(x) \geq g^T h \quad \forall h \in B(0, \varepsilon).$$

Poznámka 15 Podle věty 40 (b) je směrová derivace opěrnou funkcí subdiferenciálu, neboli

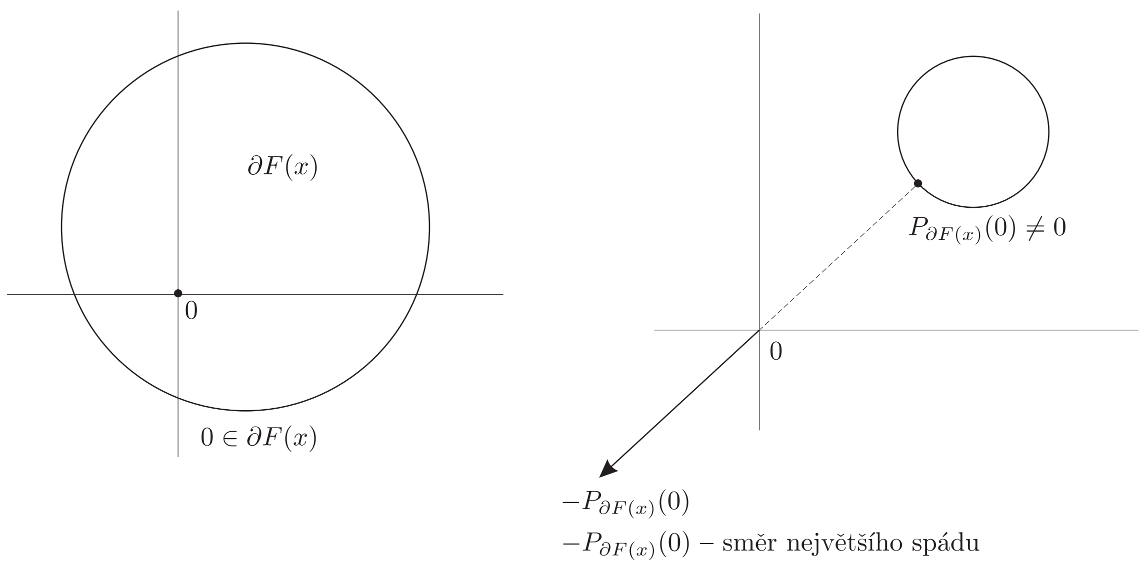
$$F'(x,h) = \delta_{\partial F(x)}(h).$$

Věta 41 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$ a diferencovatelná v bodě $x \in R^n$. Pak platí*

$$\partial F(x) = \{\nabla F(x)\}.$$

Věta 42 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$. Pak F má v bodě x lokální minimum právě tehdy, jestliže*

$$0 \in \partial F(x).$$



Věta 43 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Pak platí*

$$T_C(x) = \{y \in R^n : d'_C(x,y) = 0\}$$

($d'_C(x,y)$ je směrová derivace funkce $d_C(x)$ ve směru $y \in R^n$).

Věta 44 *Nechť $C \subset R^n$ je uzavřená konvexní množina a $x \in C$. Pak platí*

$$N_C(x) = \overline{\bigcup_{\lambda \geq 0} \lambda \partial d_C(x)}$$

Věta 45 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je dvakrát spojitě diferencovatelná v bodě $x \in R^n$. Je-li F konvexní v okolí bodu $x \in R^n$, je její Hessova matice pozitivně semidefinitní v bodě x. Je-li Hessova matice funkce F pozitivně definitní v bodě x, je tato funkce konvexní v okolí bodu x.*

Nepodmíněná minimalizace

Budeme hledat minimum funkce $F : R^n \to R$ na jejím definičním oboru $\mathcal{D}(F) \subset R^n$ (obvykle $\mathcal{D}(F) = R^n$). Předpokládáme, že $F \in C^2$ (je dvakrát spojitě diferencovatelná). Označení:

$$g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F(x)}{\partial x_1} \\ \dots \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}, \quad G(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

g – gradient, G – Hessova matice

Definice 22 *$F : R^n \to R$ je zdola omezená, existuje-li $\underline{F}$ tak, že*

$$F(x) \geq \underline{F} \quad \forall x \in R^n \tag{F1}$$

Definice 23 *$F : R^n \to R$ má kompaktní hladiny, jestliže*

$$\mathcal{L}(\overline{F}) = \{x \in R^n : F(x) \leq \overline{F}\} \tag{F2}$$

je kompaktní $\forall \overline{F} \in R$ (prázdná množina je kompaktní).

Definice 24 *$F \in C^2 : R^n \to R$ má omezené druhé derivace, existuje-li $\overline{G} > 0$ tak, že $\|G(x)\| \leq \overline{G}$ $\forall x \in R^n$, čili*

$$|d^T G(x) d| \leq \overline{G}\, \|d\|^2 \quad \forall x, d \in R^n \tag{F3}$$

Definice 25 *$F \in C^2 : R^n \to R$ je stejnoměrně konvexní, existuje-li $\underline{G} > 0$ tak, že*

$$d^T G(x) d \geq \underline{G}\, \|d\|^2 \quad \forall x, d \in R^n \tag{F4}$$

Definice 26 *$F \in C^2 : R^n \to R$ má lipschitzovské druhé derivace, jestliže existuje $\overline{L} > 0$ tak, že*

$$\|G(x+d) - G(x)\| \leq \overline{L}\, \|d\| \quad \forall x, d \in R^n \tag{F5}$$

Věta 46 *(o střední hodnotě). Nechť $F \in C^2 : R^n \to R$ a $x, d \in R^n$. Pak platí*

$$F(x+d) = F(x) + d^T g(x) + \frac{1}{2} d^T G(\tilde{x}) d$$

kde $\tilde{x} = x + \tilde{\lambda} d$ a $0 \leq \overline{\lambda} \leq 1$.

Důsledek 4 *Podmínka (F3) implikuje*

$$F(x+d) - F(x) \leq d^T g(x) + \frac{1}{2} \overline{G}\, \|d\|^2$$

Podmínka (F4) implikuje

$$F(x+d) - F(x) \geq d^T g(x) + \frac{1}{2} \underline{G}\, \|d\|^2$$

Věta 47 *(o střední hodnotě). Nechť $F \in C^2 : R^n \to R$ a $x, d \in R^n$. Pak platí*

$$g(x+d) = g(x) + \int_0^1 G(x+\lambda d)d \,\mathrm{d}\lambda$$

Důsledek 5 *Podmínka (F3) implikuje*

$$\begin{aligned} \|g(x+d) - g(x)\| &\leq \overline{G}\,\|d\| \\ d^T(g(x+d) - g(x)) &\leq \overline{G}\,\|d\|^2 \end{aligned}$$

Podmínka (F4) implikuje

$$\begin{aligned} \|g(x+d) - g(x)\| &\geq \underline{G}\,\|d\| \\ d^T(g(x+d) - g(x)) &\geq \underline{G}\,\|d\|^2 \end{aligned}$$

Podmínky optimality

Definice 27 *Řekneme, že bod $x^* \in R^n$ je lokálním minimem funkce $F : R^n \to R$ jestliže existuje $\varepsilon > 0$ tak, že*

$$F(x^*) \leq F(x) \quad \forall x \in B(x^*, \varepsilon) = \{x \in R^n : \|x - x^*\| < \varepsilon\}$$

Jestliže $F(x^*) < F(x)$ $\forall x \in B(x^*, \varepsilon) \backslash \{x^*\}$, řekneme, že bod x^* je ostrým (izolovaným) lokálním minimem funkce F.

Věta 48 *(nutné podmínky). Nechť bod $x^* \in R^n$ je lokálním minimem funkce $F \in C^2 : R^n \to R$. Pak platí*

$$\begin{aligned} g(x^*) &= 0 \\ G(x^*) &\succeq 0 \end{aligned}$$

($G(x^*)$ je pozitivně semidefinitní).

Věta 49 *(postačující podmínky). Nechť $F \in C^2 : R^n \to R$ na $B(x^*, \varepsilon)$ a nechť*

$$\begin{aligned} g(x^*) &= 0 \\ G(x^*) &\succ 0 \end{aligned}$$

($G(x^*)$ je pozitivně definitní). Pak bod x^* je ostrým (izolovaným) minimem funkce $F : R^n \to R$.

Poznámka 16 Nechť $F \in C^2 : R^n \to R$ na $B(x^*, \varepsilon)$ a nechť

$$\begin{aligned} g(x^*) &= 0 \\ G(x^*) &\succeq 0 \end{aligned}$$

Je-li $G(x^*)$ singulární, nelze rozhodnout, je-li x^* lokálním minimem.

Příklad 5 *Nechť funkce $F : R \to R$ je zadaná předpisem $F(x) = x^3$ a $x^* = 0$. Pak*

$$\begin{aligned} g(x^*) &= [F'(x^*)] = [3x^*] = [0], \quad \text{pro} \quad x^* = 0 \\ G(x^*) &= [F''(x^*)] = [6x^*] = [0], \quad \text{pro} \quad x^* = 0 \end{aligned}$$

Tedy $g(x^*) = 0$, $G(x^*) \succeq 0$, ale F má v bodě x^* inflexní bod.

Konvergence iteračních procesů

Definice 28 *Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů z R^n. Jestliže pro libovolné číslo $\varepsilon > 0$ existuje index $k(\varepsilon) \in N$ takový, že $x_i \in B(x^*, \varepsilon)$ $\forall i \geq k(\varepsilon)$, řekneme, že posloupnost $\{x_i\}$ konverguje k bodu $x^* \in R^n$ a píšeme $x_i \to x^*$.*

Poznámka 17 Jestliže $\xi_i \to 0$ (a $\xi_i \neq 0$), je výhodné používat symboly $o(\xi_i)$ a $O(\xi_i)$ pro posloupnosti takové, že

$$\|o(\xi_i)\| \,/\, \|\xi_i\| \to 0, \quad \text{a} \quad \|O(\xi_i)\| \,/\, \|\xi_i\| \leq C.$$

Pro libovolný exponent $r \in R$ platí $(1+o(\xi_i))^r = 1+o(\xi_i)$ a $(1+O(\xi_i))^r = 1+O(\xi_i)$, pokud $o(\xi_i) \to 0$ a $O(\xi_i) \to 0$. Jestliže $\xi_i = O(\eta_i)$ a $\eta_i = O(\xi_i)$, budeme říkat, že posloupnosti $\{\xi_i\}$ a $\{\eta_i\}$ jsou ekvivalentní a budeme psát $\xi_i \sim \eta_i$.

Věta 50 *Nechť $x_i \to x^*$ a $d_i \to 0$, kde $x^* \in R^n$ je stacionární bod funkce $F \in C^2 : R^n \to R$ (tj. $g(x^*) = 0$). Označme $e_i = x_i - x^*$. Pak platí*

$$\begin{aligned}
F(x_i + d_i) - F(x_i) &= d_i^T g_i + \frac{1}{2} d_i^T G_i d_i + o\left(\|d_i\|^2\right) = d_i^T g_i + \frac{1}{2} d_i^T G^* d_i + o\left(\|d_i\|^2\right) \\
g(x_i + d_i) - g(x_i) &= G_i d_i + o\left(\|d_i\|\right) = G^* d_i + o\left(\|d_i\|\right)
\end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned}
F(x_i) - F(x^*) &= \frac{1}{2} e_i^T G^* e_i + o\left(\|e_i\|^2\right) \\
g(x_i) &= G^* e_i + o\left(\|e_i\|\right)
\end{aligned}$$

Poznámka 18 Platí-li (F5), můžeme $o\left(\|d_i\|^2\right)$ a $o\left(\|d_i\|\right)$ nahradit $O\left(\|d_i\|^3\right)$ a $O\left(\|d_i\|^2\right)$.

Definice 29 *Posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ konverguje k bodu x^* (alespoň) R-lineárně, jestliže*

$$\limsup_{i \to \infty} \|x_i - x^*\|^{\frac{1}{i}} < 1.$$

Věta 51 *Posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ konverguje k bodu x^* (alespoň) R-lineárně právě tehdy, existují-li čísla $0 < q < 1$, $M > 0$ a index $k \in N$ taková, že*

$$\|x_i - x^*\| \leq M q^{i-k} \|x_k - x^*\|$$

$\forall i \geq k$.

Definice 30 *Posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ konverguje k bodu x^* R-superlineárně, jestliže*

$$\lim_{i \to \infty} \|x_i - x^*\|^{\frac{1}{i}} = 0$$

Definice 31 *Posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ konverguje k bodu x^* (alespoň) Q-lineárně, jestliže*

$$\limsup_{i \to \infty} \frac{\|x_{i+1} - x^*\|}{\|x_i - x^*\|} < 1.$$

Věta 52 *Posloupnost* $\{x_i\} \subset R^n$ *konverguje k bodu* x^* *(alespoň) Q-lineárně právě tehdy, existuje-li číslo* $0 < q < 1$ *a index* $k \in N$ *tak, že*

$$\frac{\|x_{i+1} - x^*\|}{\|x_i - x^*\|} \le q$$

$\forall i \ge k$.

Definice 32 *Posloupnost* $\{x_i\} \subset R^n$ *konverguje k bodu* x^* *Q-superlineárně, jestliže*

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\|x_{i+1} - x^*\|}{\|x_i - x^*\|} = 0$$

Věta 53 *Nechť* $x_i \to x$ *Q-lineárně (Q-superlineárně). Pak* $x_i \to x$ *R-lineárně (R-superlineárně).*

Definice 33 *Posloupnost* $\{x_i\} \subset R^n$ *konverguje k bodu* x^* *m-krokově Q-superlineárně, jestliže existuje číslo* $m \in N$ *takové, že*

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\|x_{i+m} - x^*\|}{\|x_i - x^*\|} = 0.$$

Posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ *konverguje k bodu* x^* *cyklicky m-krokově Q-superlineárně, jestliže existuje číslo* $m \in N$ *takové, že*

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\|x_{(k+1)m+1} - x^*\|}{\|x_{km+1} - x^*\|} = 0.$$

Poznámka 19 m-kroková Q-superlineární konvergence implikuje cyklickou m-krokově Q-superlineární konvergenci.

Věta 54 *Nechť* $x_i \to x^*$ *cyklicky m-krokově Q-superlineárně a nechť existuje konstanta* $C > 0$ *taková, že* $\|e_{i+1}\| \le C\|e_i\|$ $\forall i \in N$. *Pak* $x_i \to x^*$ *R-superlineárně.*

Základní optimalizační metody

Definice 34 *Základní optimalizační metodou nazýváme iterační proces, jehož výsledkem je posloupnost* $\{x_i\} \subset R^n$ *taková, že*

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i s_i$$

kde směrový vektor $s_i \in R^n$ *se určuje na základě hodnot* x_j, F_j, g_j, G_j, $1 \le j \le i$, *a délka kroku* $\alpha_i > 0$ *se určuje na základě chování funkce* $F : R^n \to R$ *v okolí bodu* $x_i \in R^n$.

Definice 35 *Řekneme, že základní optimalizační metoda je globálně konvergentní, jestliže pro libovolný počáteční bod* $x_1 \in R^n$ *platí*

$$\liminf_{i \to \infty} \|g(x_i)\| = 0\,.$$

Poznámka 20 Definice 35 nezaručuje, že posloupnost $\{x_i\}$ konverguje (může divergovat nebo mít více hromadných bodů, z nichž některé nemusí být stacionárními body). Dokonce, když $x_i \to x^*$, nemusí $x^* \in R^n$ být lokálním minimem funkce F (je to vždy stacionární bod, který může být například sedlovým bodem).

Metoda největšího spádu:

$$\begin{aligned} s_i &= -g(x_i) \\ \alpha_i &= \arg\min_{\alpha \geq 0} F(x_i + \alpha s_i) \end{aligned}$$

Výhody:

- je globálně konvergentní
- používá pouze vektory ($O(n)$ paměťových míst a operací)

Nevýhody:

- vyžaduje přesný výběr délky kroku
- je pouze R-lineárně konvergentní

$$\limsup_{i \to \infty} \|x_i - x^*\|^{\frac{1}{i}} \leq \frac{\kappa(G(x^*)) - 1}{\kappa(G(x^*)) + 1}$$

Newtonova metoda:

$$\begin{aligned} s_i &= -G^{-1}(x_i)\, g\,(x_i) \\ \alpha_i &= 1 \end{aligned}$$

Výhody:

- je superlineárně konvergentní
- používá jednoduchý výběr délky kroku

Nevýhody:

- není globálně konvergentní, je-li x_1 daleko of x^*, nemusí konvergovat
- používá matici řádu n a je potřeba řešit soustavu lineárních rovnic ($O(n^2)$ paměťových míst, $O(n^3)$ operací)
- je třeba počítat druhé derivace

Metody spádových směrů

Předpokládáme, že $g_i \neq 0$, $s_i \neq 0$ $\forall i \in N$ a označíme

$$c_i = -\frac{s_i^T g_i}{\|s_i\| \, \|g_i\|}$$

(směrový kosinus).

Definice 36 *Řekneme, že směrové vektory $s_i \in R^n$, $i \in N$, jsou spádové, jestliže platí*

$$c_i > 0 \quad \forall i \in N \tag{S1a}$$

Řekneme, že směrové vektory $s_i \in R^n$, $i \in N$, jsou stejnoměrně spádové, jestliže existuje konstanta $\underline{c} > 0$ taková, že

$$c_i \geq \underline{c} \quad \forall i \in N \tag{S1b}$$

Věta 55 *Nechť $s_i = -H_i g_i$ (nebo $B_i s_i = -g_i$) kde H_i (nebo B_i) je symetrická positivně definitní matice. Pak platí*

$$c_i^2 \geq \frac{1}{\kappa_i}$$

kde κ_i je spektrální číslo podmíněnosti matice H_i (nebo B_i).

Definice 37 *Řekneme, že délky kroku $\alpha_i > 0$, $i \in N$, splňují silnou Wolfeho podmínku nebo slabou Wolfeho podmínku nebo Goldsteinovu podmínku nebo Armijovu podmínku, jestliže existují čísla $0 \leq \varepsilon_1 < 1/2$, $\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < 1$ tak, že*

$$F_{i+1} - F_i \leq \varepsilon_1 \alpha_i s_i^T g_i \tag{S2}$$

a buď

$$|s_i^T g_{i+1}| \leq \varepsilon_2 |s_i^T g_i| \tag{S3a}$$

nebo

$$s_i^T g_{i+1} \geq \varepsilon_2 s_i^T g_i \tag{S3b}$$

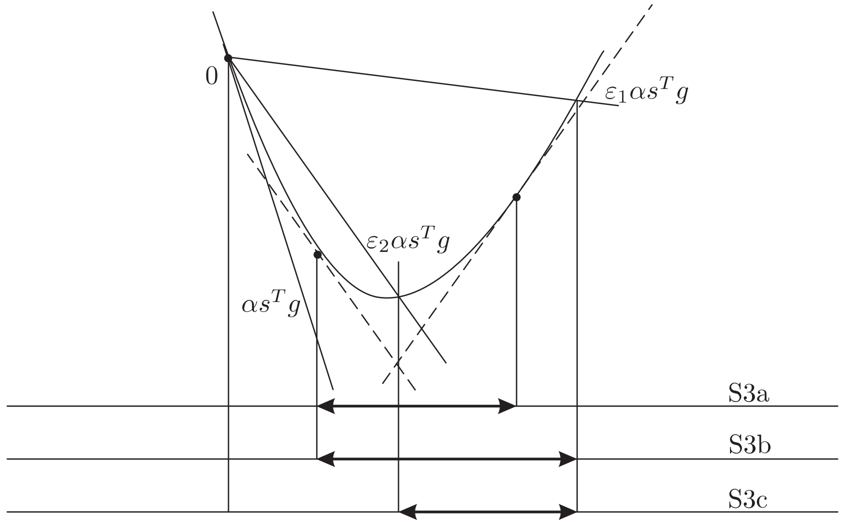
nebo

$$F_{i+1} - F_i \geq \varepsilon_2 \alpha_i s_i^T g_i \tag{S3c}$$

nebo $\alpha_i > 0$ je první člen vyhovující podmínce (S2) v posloupnosti $\{\alpha_i^j\}$, $j \in N$, takové, že $\underline{\alpha}\|g_i\|/\|s_i\| \leq \alpha_i^1 \leq \overline{\alpha}\|g_i\|/\|s_i\|$ a

$$\underline{\beta}\alpha_i^j \leq \alpha_i^{j+1} \leq \overline{\beta}\alpha_i^j \tag{S3d}$$

$\forall i \in N$, kde $0 < \underline{\alpha} < \overline{\alpha}$ a $0 < \underline{\beta} \leq \overline{\beta} < 1$ jsou konstanty nezávislé na indexu $i \in N$.



Poznámka 21 (Konzistence) Nechť funkce $F : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3) a směrový vektor $s_i \in R^n$ je spádový. Pak existuje délka kroku $\alpha_i > 0$ splňující podmínku (S2) a libovolnou z podmínek (S3a)-(S3d).

Poznámka 22 Použití uvedených podmínek:
(S3a) - metody sdružených gradientů
(S3b) - metody s proměnnou metrikou
(S3c) - numerický výpočet gradientů
(S3d) - nehladké úlohy

Definice 38 *Základní optimalizační metoda (Definice 34) je metodou spádových směrů (stejnoměrně spádových směrů), jestliže směrové vektory $s_i \in R^n$, $i \in N$, splňují podmínku (S1a) (podmínku (S1b)) a délky kroku $\alpha_i > 0$, $i \in N$, splňují podmínku (S2) a některou z podmínek (S3a)-(S3d).*

Poznámka 23 Metoda největšího spádu $s_i = -g_i$ je metodou stejnoměrně spádových směrů, protože $s_i^T g_i = -\|g_i\|^2 = -\|s_i\|\|g_i\|$ a (S1b) platí pro $\underline{c} = 1$.

Věta 56 *(Globální konvergence) Nechť funkce $F \in C^2 : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3). Pak metoda spádových směrů je globálně konvergentní, jestliže platí*

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = \infty$$

Poznámka 24 Jestliže $s_i = -H_i g_i$ (nebo $B_i s_i = -g_i$), můžeme předchozí podmínku nahradit podmínkou

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\kappa_i} = \infty$$

kde κ_i jsou spektrální čísla podmíněnosti matic H_i (nebo B_i).

Poznámka 25 Pro metodu stejnoměrně spádových směrů platí $\|g_i\| \to 0$. (Je to silnější tvrzení než globální konvergence podle Definice 35).

Poznámka 26 Zvolíme $\underline{c} > 0$ a položíme $s_i = -g_i$ (restart), kdykoliv vyjde $c_i < \underline{c}$. Tato úprava zaručuje globální konvergenci.

Věta 57 *(Superlineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou spádových směrů taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je stacionárním bodem funkce $F \in C^2 : R^n \to R$, která vyhovuje podmínkám (F3) a (F4). Nechť*

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\|B_i s_i + g_i\|}{\|g_i\|} = 0$$

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\|(B_i - G_i)s_i\|}{\|s_i\|} = 0$$

a nechť $\alpha_i = 1$ kdykoliv tato hodnota vyhovuje podmínkám (S2) a některé z (S3a)-(S3d). Pak existuje index $k \in N$ takový, že $\alpha_i = 1$ $\forall i \geq k$ a $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.

Algoritmus 1 (výběr délky kroku splňující (S2) a (S3b))

Data: $0 < \underline{\beta} \leq \overline{\beta} < 1 < \underline{\gamma} < \overline{\gamma}$. Počáteční hodnota $\alpha > 0$.

K1: **Set** $\overline{\alpha} := 0$.

K2: **Set** $\underline{\alpha} := \overline{\alpha}$, $\overline{\alpha} := \alpha$. **If** (S2) **and** (S3b) **stop** ($\alpha_i = \alpha$). **If not** (S2) **go to** K4.

K3: Určíme α tak, že $\underline{\gamma}\overline{\alpha} \leq \alpha \leq \overline{\gamma\alpha}$ (extrapolace). **Go to** K2.

K4: Určíme α tak, že $\underline{\beta}(\overline{\alpha} - \underline{\alpha}) \leq (\alpha - \underline{\alpha}) \leq \overline{\beta}(\overline{\alpha} - \underline{\alpha})$ (interpolace).

K5: **If** (S2) **and** (S3b) **stop** ($\alpha_i = \alpha$). **If not** (S2) **set** $\overline{\alpha} := \alpha$ **else set** $\underline{\alpha} := \alpha$. **Go to** K4.

Poznámka 27 Extrapolace a interpolace.

$$\varphi(\alpha) = F(x_i + \alpha s_i), \quad \varphi'(\alpha) = s_i^T g(x_i + \alpha s_i)$$

$$\begin{aligned} A &= \frac{\varphi(\overline{\alpha}) - \varphi(\underline{\alpha})}{(\overline{\alpha} - \underline{\alpha})\varphi'(\underline{\alpha})} \\ B &= \frac{\varphi'(\overline{\alpha})}{\varphi'(\underline{\alpha})} \end{aligned}$$

Kvadratická (dvě hodnoty):

$$\alpha - \underline{\alpha} = \frac{\overline{\alpha} - \underline{\alpha}}{2(1 - A)}$$

Kvadratická (dvě derivace):

$$\alpha - \underline{\alpha} = \frac{\overline{\alpha} - \underline{\alpha}}{1 - B}$$

Kubická:

$$\alpha - \underline{\alpha} = \frac{\overline{\alpha} - \underline{\alpha}}{D + \sqrt{D^2 - 3C}}$$

$$\begin{aligned} C &= (B - 1) - 2(A - 1) \\ D &= (B - 1) - 3(A - 1) \end{aligned}$$

Definice 39 *Jestliže platí*

$$s_i^T g(x_i + \alpha_i s_i) = 0 \quad \forall i \in N$$

řekneme, že výběr délky kroku je přesný. Jestliže platí

$$\lim_{i\to\infty} \frac{s_i^T g(x_i + \alpha_i s_i)}{s_i^T g_i} = 0$$

řekneme, že výběr délky kroku je asymptoticky přesný.

Poznámka 28 Pokud v každé iteraci používáme alespoň jednu kvadratickou nebo kubickou interpolaci (Algoritmus 1, Poznámka 10), je výběr délky kroku asymptoticky přesný.

Věta 58 *(R-lineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou stejnoměrně spádových směrů s asymptoticky přesným výběrem délky kroku taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je stacionárním bodem funkce $F \in C^2 : R^n \to R$, která vyhovuje podmínkám (F3) a (F4). Pak platí*

$$\limsup_{i\to\infty} \|x_i - x^*\|^{\frac{1}{i}} \le \frac{\kappa(G^*) - 1 + (\kappa(G^*) + 1)\sqrt{1 - \underline{c}^2}}{\kappa(G^*) + 1 + (\kappa(G^*) - 1)\sqrt{1 - \underline{c}^2}}$$

kde $\kappa(G^*)$ je spektrální číslo podmíněnosti matice G^* a $\underline{c}$ je konstanta v (S1b).

Důsledek 6 *Pro metodu největšího spádu lze položit $\underline{c} = 1$, takže platí*

$$\limsup_{i\to\infty} \|x_i - x^*\|^{\frac{1}{i}} \le \frac{\kappa(G^*) - 1}{\kappa(G^*) + 1}$$

Metody sdružených gradientů

Definice 40 *Řekneme, že metoda spádových směrů je metodou sdružených gradientů (CG), jestliže*

$$s_1 = -g_1 \quad a \quad s_{i+1} = -g_{i+1} + \beta_i s_i \quad pro \quad i \in N, \tag{CGa}$$

kde parametr β_i se vybírá tak, aby směrové vektory s_i, $1 \le i \le n$, byly sdružené (nebo G–ortogonální), aplikujeme-li tuto metodu na ryze konvexní kvadratickou funkci

$$Q(x) = \frac{1}{2}(x - x^*)^T G(x - x^*)$$

a používáme-li přesný výběr délky kroku (platí $s_i^T g_{i+1} = 0 \ \forall i \in N$).

Poznámka 29 Označme $d_i = x_{i+1} - x_i = \alpha_i s_i$ a $y_i = g_{i+1} - g_i$. Pak pro kvadratickou funkci Q platí $y_i = G d_i$ a podmínku G–ortogonality vektorů s_i, s_{i+1} lze zapsat ve tvaru $\alpha_i s_i^T G s_{i+1} = y_i^T s_{i+1} = 0$ (předpokládáme, že $\alpha_i \ne 0$). Odtud prostřednictvím (CGa) dostaneme rovnici $\beta_i y_i^T s_i - y_i^T g_{i+1} = 0$ neboli

$$\beta_i = \frac{y_i^T g_{i+1}}{y_i^T s_i}. \tag{CGb}$$

Tato volba již zaručuje vzájemnou G–ortogonalitu směrových vektorů s_i, $1 \le i \le n$.

Věta 59 *(Kvadratické ukončení) Nechť $Q : R^n \to R$ je ryze konvexní kvadratická funkce a $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou (CGa)–(CGb) s přesným výběrem délky kroku. Pak pro $1 \le j < i \le n+1$ platí*

$$\begin{aligned} s_j^T g_i &= 0 \quad \textit{(biortogonalita směrů a gradientů)} \\ g_j^T g_i &= 0 \quad \textit{(ortogonalita gradientů)} \\ s_j^T G s_i &= 0 \quad \textit{(sdruženost směrů)} \end{aligned}$$

Navíc existuje index $m \le n$ takový, že $g_{m+1} = 0$ a $x_{m+1} = x^*$.

Poznámka 30 Používáme-li přesný výběr délky kroku, můžeme podle (CGa) psát

$$y_i^T s_i = g_{i+1}^T s_i - g_i^T s_i = -g_i^T s_i = g_i^T g_i - \beta_{i-1} g_i^T s_{i-1} = g_i^T g_i.$$

Je-li navíc minimalizovaná funkce kvadratická, platí $g_i^T g_{i+1} = 0$, takže

$$y_i^T g_{i+1} = g_{i+1}^T g_{i+1} - g_i^T g_{i+1} = g_{i+1}^T g_{i+1}.$$

Odtud plyne, že ve vzorci pro β_i můžeme použít tři různé jmenovatele a dva různé čitatele, aniž bychom porušili platnost věty 59. Dostaneme tak šest základních metod sdružených gradientů.

$$\beta_i^{HS} = \frac{y_i^T g_{i+1}}{y_i^T s_i}, \quad \beta_i^{PR} = \frac{y_i^T g_{i+1}}{g_i^T g_i}, \quad \beta_i^{LS} = \frac{y_i^T g_{i+1}}{|g_i^T s_i|}$$

(HS – Hestenes a Stiefel, PR – Polak a Ribiére, LS – Liu a Storey),

$$\beta_i^{DY} = \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{y_i^T s_i}, \quad \beta_i^{FR} = \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{g_i^T g_i}, \quad \beta_i^{CD} = \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{|g_i^T s_i|}$$

(DY – Dai a Yuan, FR – Fletcher a Reeves, CD – conjugate descent).

Poznámka 31 Metody sdružených gradientů můžeme rozdělit do dvou skupin:

- Metody HS, PR, LS jsou výhodnější pro praktické použití, ale nejsou bez nutných úprav globálně konvergentní.
- Metody DY, FR, CD jsou za určitých předpokladů (výběr délky kroku) globálně konvergentní, ale hůře zachovávají sdruženost směrových vektorů.
- Metody patřící do téže skupiny se svými vlastnostmi příliš neliší.

Globální konvergence

Věta 60 *(Globální konvergence metody DY) Nechť $F : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3). Pak metoda CG s výběrem délky kroku splňujícím slabou Wolfeho podmínku (S2), (S3b) je globálně konvergentní, pokud*

$$\beta_i = \lambda_i \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{y_i^T s_i}$$

kde $-(1-\varepsilon_2)/(1+\varepsilon_2) \le \lambda_i \le 1$.

Věta 61 *(Globální konvergence metody FR) Nechť $F : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3). Pak metoda CG s výběrem délky kroku splňujícím silnou Wolfeho podmínku (S2), (S3a) s $\varepsilon_2 < 1/2$ je globálně konvergentní, pokud*

$$\beta_i = \lambda_i \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{g_i^T g_i}$$

kde $|\lambda_i| \le 1$.

Poznámka 32 Metody HS, PR, LS dávají lepší výsledky než metody DY, FR, CD. Konvergenci prvních metod lze zlepšit vyloučením záporných hodnot:

$$\beta_i^{HS+} = \max(0, \beta_i^{HS}), \quad \beta_i^{PR+} = \max(0, \beta_i^{PR}), \quad \beta_i^{LS+} = \max(0, \beta_i^{LS}),$$

nebo kombinováním s druhými metodami:

$$\beta_i^{HS/DY} = \max(0, \min(\beta_i^{HS}, \beta_i^{DY})),$$

$$\beta_i^{PR/FR} = \max(0, \min(\beta_i^{PR}, \beta_i^{FR})),$$

$$\beta_i^{LS/CD} = \max(0, \min(\beta_i^{LS}, \beta_i^{CD})).$$

Kombinované metody jsou globálně konvergentní za stejných předpokladů jako metody DY, FR, CD a dávají stejně dobré výsledky jako metody HS, PR, LS.

Asymptotická rychlost konvergence

Lemma 3 *Nechť jsou splněny předpoklady věty 59. Nechť $g_i \neq 0$ pro nějaký index $1 \le i \le n$. Pak platí*

$$\frac{Q(x_{i+1}) - Q(x^*)}{Q(x_1) - Q(x^*)} \le \max_{1 \le k \le n} P_i^2(\lambda_k), \tag{1}$$

kde $P_i(\lambda)$ je libovolný polynom stupně i takový, že $P_i(0) = 1$, a λ_k, $1 \le k \le n$, jsou vlastní čísla matice G seřazená vzestupně.

Věta 62 *Nechť jsou splněny předpoklady věty 59. Nechť $g_i \neq 0$ pro nějaký index $1 \le i \le n$. Pak platí*

$$\frac{Q(x_{i+1}) - Q(x^*)}{Q(x_1) - Q(x^*)} \le \left(\frac{\lambda_{m+1-i} - \lambda_1}{\lambda_{m+1-i} + \lambda_1} \right)^2, \tag{2}$$

kde λ_k, $1 \le k \le m$, jsou různá vlastní čísla matice G seřazená vzestupně.

Důsledek 7 *Metoda CG s přesným výběrem délky kroku nalezne minimum ryze konvexní kvadratické funkce po nejvýše m krocích, kde m je počet různých vlastních čísel matice G.*

Věta 63 *Nechť jsou splněny předpoklady věty 59. Nechť $g_i \neq 0$ pro nějaký index $1 \le i \le n$. Pak platí*

$$\frac{Q(x_{i+1}) - Q(x^*)}{Q(x_1) - Q(x^*)} \le 4 \left(\frac{\sqrt{\kappa(G)} - 1}{\sqrt{\kappa(G)} + 1} \right)^{2i}. \tag{3}$$

Definice 41 *Řekneme, že metoda CG je cyklicky přerušovaná, jestliže* $\beta_i = 0$, $i \in M$, *kde*

$$M = \{(i-1)n + 1 : i \in N\}$$

(vždy po n *krocích se provede restart).*

Věta 64 *Nechť* $\{x_i\} \subset R^n$ *je posloupnost bodů získaná cyklicky přerušovanou metodou CG s asymptoticky přesným výběrem délky kroku taková, že* $x_i \to x^*$, *kde* $x^* \in R^n$ *je stacionárním bodem funkce* $F \in C^2 : R^n \to R$, *která vyhovuje podmínkám (F3)-(F5). Pak* $x_i \to x^*$ *R-superlineárně.*

Věta 65 *Nechť jsou splněny předpoklady věty 64. Pak uvnitř každého cyklu* $x_i \to x^*$ *alespoň R-lineárně s asymptotickou rychlostí*

$$q \leq \frac{\sqrt{\kappa(G^*)} - 1}{\sqrt{\kappa(G^*)} + 1}$$

Poznámka 33 Odhad $(\sqrt{\kappa} - 1)/(\sqrt{\kappa} + 1)$ je příznivější než odhad $(\kappa - 1)/(\kappa + 1)$ platný pro metodu spádových směrů.

κ	ε	SD	CG
10^2	10^{-4}	460	46
10^4	10^{-6}	69077	690
10^6	10^{-8}	9210340	9210

V tabulce je uvedeno číslo podmíněnosti κ, požadovaná přesnost ε a počet iterací potřebných k dosažení požadované přesnosti.

Modifikace a implementace metod sdružených gradientů

Věta 66 *Uvažujme modifikované metody sdružených gradientů dané předpisem*

$$s_1 = -g_1 \quad a \quad s_{i+1} = -\vartheta_i g_{i+1} + \beta_i s_i \quad pro \quad i \in N,$$

kde β_i *nabývá hodnot* β_i^{DY}, β_i^{FR}, β_i^{CD} *a* ϑ_i *hodnot*

$$\vartheta_i^{DY} = \frac{y_i^T s_i}{y_i^T s_i} = 1, \quad \vartheta_i^{FR} = \frac{y_i^T s_i}{g_i^T g_i}, \quad \vartheta_i^{CD} = \frac{y_i^T s_i}{|g_i^T s_i|}.$$

Pak platí věta 59. Splňuje-li funkce $F : R^n \to R$ *podmínky (F1) a (F3), jsou modifikované metody DY, FR, CD s výběrem délky kroku splňujícím slabou Wolfeho podmínku (S2), (S3b) globálně konvergentní,*

Věta 67 *Uvažujme modifikované metody sdružených gradientů dané předpisem*

$$s_1 = -g_1 \quad a \quad s_{i+1} = -\vartheta_i g_{i+1} + \beta_i s_i \quad pro \quad i \in N,$$

kde β_i *nabývá hodnot* β_i^{HS}, β_i^{PR}, β_i^{LS} *a* ϑ_i *hodnot*

$$\vartheta_i^{HS} = \frac{y_i^T s_i}{y_i^T s_i} = 1, \quad \vartheta_i^{PR} = \frac{y_i^T s_i}{g_i^T g_i}, \quad \vartheta_i^{LS} = \frac{y_i^T s_i}{|g_i^T s_i|}.$$

Pak platí věta 59 a navíc $y_i^T s_{i+1} = 0 \; \forall i \in N$.

Poznámka 34 Účinnost metod CG lze zvýšit restartováním. Je vhodné testovat spádovost směrových vektorů.. V tomto případě položíme $\beta_i = 0$, pokud neplatí

$$-g_{i+1}^T s_{i+1} \geq \varepsilon_0 \|g_{i+1}\| \|s_{i+1}\|,$$

kde $\varepsilon_0 \approx 10^{-8}$. Používáme-li metody DY, FR, CD, je výhodné testovat sdruženost směrových vektorů. V tomto případě položíme $\beta_i = 0$, pokud neplatí

$$y_i^T s_{i+1} \leq \eta_1 \|s_{i+1}\| \|y_i\|, \tag{4}$$

kde $\eta_1 \approx 0.005$.

Poznámka 35 V případě metod CG je vhodné používat silnou Wolfeho podmínku s $\varepsilon_1 = 10^{-4}$ a $\varepsilon_2 = 10^{-1}$. Algoritmus 1 je třeba upravit tak, že (S3b) ponecháme beze změny a společně s (S2) vyhodnocujeme podmínku

$$s_i^T g_{i+1} \leq \varepsilon_2 |s_i^T g_i|,$$

která je částí (S3a).

Algoritmus 2 (Metoda sdružených gradientů)

Data $\varepsilon_1 = 10^{-4}$, $\varepsilon_2 = 10^{-1}$, $\eta_1 = 0.05$, $\underline{\varepsilon} > 0$.

K1: Zvolíme $x_1 \in R^n$. **Set** $F_1 := F(x_1)$, $g_1 := g(x_1)$. **Set** $i := 1$.

K2: **If** $\|g_i\| \leq \underline{\varepsilon}$ **stop**. Určíme směrový vektor s_i pomocí zvolené metody a rozhodneme o přerušení iteračního procesu podle poznámky 34.

K3: Určíme délku kroku $\alpha_i > 0$ použitím algoritmu 1 upraveného podle poznámky 35. **Set** $x_{i+1} := x_i + \alpha_i s_i$, $F_{i+1} := F(x_{i+1})$, $g_{i+1} := g(x_{i+1})$. **Set** $i := i + 1$, **go to** K2.

Lineární metoda sdružených gradientů

Nechť B je symetrická pozitivně definitní matice. Pak řešení soustavy rovnic

$$Bs = -g$$

je ekvivalentní minimalizaci kvadratické funkce

$$\frac{1}{2} s^T B s + g^T s$$

Používá se předpodmínění: C je symetrická pozitivně definitní snadno invertovatelná matice (předpodmiňovač),

$$\begin{aligned} C^{-\frac{1}{2}} B C^{-\frac{1}{2}} C^{\frac{1}{2}} s &= -C^{-\frac{1}{2}} g, \\ \tilde{B} \tilde{s} &= -\tilde{g}, \end{aligned}$$

kde $\tilde{B}$ je předpodmíněná matice. Měla by být co nejlépe podmíněná ($\kappa(\tilde{B}) \ll \kappa(B)$).

Algoritmus 3 (Metoda PCG pro řešení soustavy lineárních rovnic)

Data: $0 \le \omega < 1$

K1: **Set** $s := 0$, $r := -g$, $p := 0$, $\beta := 0$

K2: **While** $\|r\| > \omega \|g\|$ **do**

$$\begin{array}{lll} \tilde{r} := C^{-1} r, & \gamma := r^T \tilde{r}, & \beta := \beta\gamma \\ p := \tilde{r} + \beta p, & q := Bp, & \alpha := \gamma / p^T q \\ s := s + \alpha p, & r := r - \alpha q, & \beta := 1/\gamma \end{array}$$

end while

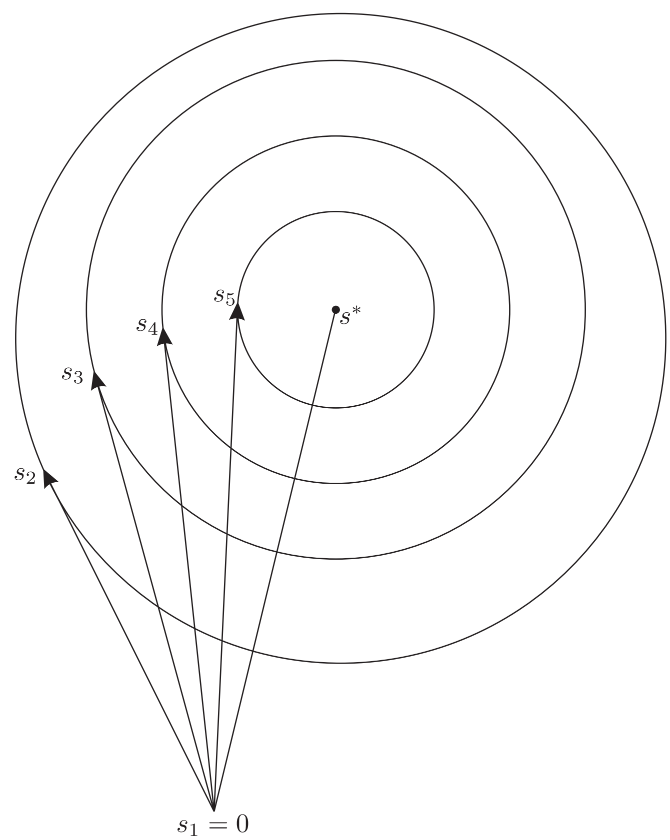
Věta 68 *Aplikujeme-li metodu PCG s* $C = I$ *na kvadratickou funkci* $Q(s)$ *a platí-li* $g_j^T g_j > 0$, $p_j^T B p_j > 0$ *pro* $1 \le j \le i$, *můžeme pro* $0 < \alpha < \alpha_i$ *psát*

$$Q(s_{i+1}) < Q(s_i(\alpha)) < Q(s_i),$$

$$g^T s_{i+1} < g^T s_i(\alpha) < g^T s_i,$$

$$\|s_{i+1}\| > \|s_i(\alpha)\| > \|s_i\|,$$

$$\frac{g^T s_{i+1}}{\|g\| \|s_{i+1}\|} > \frac{g^T s_i(\alpha)}{\|g\| \|s_i(\alpha)\|} > \frac{g^T s_i}{\|g\| \|s_i\|}.$$



Věta 69 *Jsou-li splněny předpoklady věty 68, platí*

$$-Q(s_{i+1}) \geq \frac{1}{2}\frac{\|g\|^2}{\|B\|}, \quad -g^T s_{i+1} \geq \frac{\|g\|^2}{\|B\|}.$$

Je-li navíc matice B pozitivně definitní, platí

$$-\frac{g^T s_{i+1}}{\|g\|\|s_{i+1}\|} \geq \frac{1}{\sqrt{\kappa(B)}}.$$

Metody s proměnnou metrikou

Definice 42 *Řekneme, že základní optimalizační metoda je metodou s proměnnou metrikou (VM), jestliže*

$$s_i = -H_i g_i \quad \forall i \in N$$

kde H_i, $i \in N$ jsou s.p.d. matice takové, že $H_1 = I$ a

$$H_{i+1} = \gamma_i(H_i + U_i M_i U_i^T)$$

kde $U_i \in R^{n\times 2}$ a kde $M_i \in R^{2\times 2}$ se vybírá tak, aby byla splněna kvazinewtonovská (QN) podmínka

$$H_{i+1} y_i = \rho_i d_i$$

Přitom $\gamma_i > 0$, $\rho_i > 0$, $d_i = x_{i+1} - x_i$, $y_i = g_{i+1} - g_i$.

Poznámka 36 Nejefektivnější metody VM patří do Broydenovy třídy, kde

$$U_i = [d_i, H_i y_i]$$

Poznámka 37 Zjednodušení: i vynecháme a $i+1$ nahradíme $+$.

Věta 70 *Nechť $H_+ = \gamma(H + UMU^T)$, kde $U = [d, Hy]$. Pak QN podmínka $H_+ y = \rho d$ platí právě tehdy, jestliže*

$$M = \begin{bmatrix} \frac{1}{b}\left(\eta\frac{a}{b} + \frac{\rho}{\gamma}\right), & -\frac{\eta}{b} \\ -\frac{\eta}{b}, & \frac{\eta-1}{a} \end{bmatrix}$$

kde η je volný parametr a kde $a = y^T H y$, $b = y^T d$, $c = d^T H^{-1} d$.

Poznámka 38 Po roznásobení dostaneme

$$H_+ = \gamma\left(H + \frac{\rho}{\gamma}\frac{1}{b}dd^T - \frac{1}{a}Hy(Hy)^T + \frac{\eta}{a}\left(\frac{a}{b}d - Hy\right)\left(\frac{a}{b}d - Hy\right)^T\right) \tag{H}$$

Nejznámější metody z Broydenovy třídy:

- Davidon, Fletcher, Powell (DFP): $\eta = 0$:

$$H_+ = \gamma\left(H + \frac{\rho}{\gamma}\frac{1}{b}dd^T - \frac{1}{a}Hy(Hy)^T\right)$$

- Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno (BFGS): $\eta = 1$

$$H_+ = \gamma\Big(H + \left(\frac{\rho}{\gamma} + \frac{a}{b}\right)\frac{1}{b}dd^T - \frac{1}{b}(Hyd^T + d(Hy)^T)\Big)$$

- Metoda hodnosti 1 (R1) $\eta = (\rho/\gamma)/(\rho/\gamma - a/b)$:

$$H_+ = \gamma\left(H + \frac{\frac{\rho}{\gamma}}{\frac{\rho}{\gamma}b - a}\left(\frac{\rho}{\gamma}d - Hy\right)\left(\frac{\rho}{\gamma}d - Hy\right)^T\right)$$

Poznámka 39 Vlastnosti:

- DFP – velmi špatná, pomalá konvergence
- BFGS – spolehlivá a efektivní
- R1 – matice H_+ nemusí být s.p.d. $\rightarrow$ selhání metody

Poznámka 40 Škálování:

- Pro metodu DFP volíme γ tak aby platilo $\rho/\gamma = b/c$
- Pro metodu BFGS volíme γ tak aby platilo $\rho/\gamma = a/b$
- Pro metodu R1 volíme γ tak aby platilo $\rho/\gamma = \sqrt{a/c}$

Tyto hodnoty se používají pouze tehdy, leží-li γ v intervalu $[1, 6]$, jinak se volí $\gamma = 1$.

Poznámka 41 Korekce: Parametr ρ se nejčastěji volí podle vzorce

$$\rho = \frac{d^Ty}{2(F - F_+ - s^Tg_+)}$$

odvozeného z věty o střední hodnotě (Spedicato).

Věta 71 *Nechť matice H je s.p.d., $a > 0$, $b > 0$, $c > 0$, $ac - b^2 > 0$ a nechť platí (H) s $\gamma > 0$, $\rho > 0$. Pak H_+ je s.p.d. právě tehdy, jestliže $\eta \geq \eta^*$, kde $\eta^* = -b^2/(ac - b^2) < 0$.*

Poznámka 42 Podmínka pro s.p.d. je vždy splněna pro $\eta \geq 0$ (perfektní část Broydenovy třídy).

Věta 72 *(Inverzní VM metody) Nechť jsou splněny předpoklady Věty 71 a nechť $B = H^{-1}$ a $B_+ = H_+^{-1}$ (H_+ je určená podle (H)). Pak platí*

$$B_+ = \frac{1}{\gamma}\left(B + \frac{\gamma}{\rho}\frac{1}{b}yy^T - \frac{1}{c}Bd(Bd)^T + \frac{\beta}{c}\left(\frac{c}{b}y - Bd\right)\left(\frac{c}{b}y - Bd\right)^T\right) \qquad \text{(B)}$$

kde

$$\beta\eta(ac - b^2) + (\beta + \eta)b^2 = b^2$$

Poznámka 43 (Dualita) Vztah (B) dostaneme z (H) záměnou $\gamma \to 1/\gamma$, $\rho \to 1/\rho$, $a \to c$, $c \to a$, $d \to y$, $y \to d$, $H \to B$, $\eta \to \beta$. Metody DFP a BFGS jsou navzájem duální. Metoda R1 je samoduální.

- DFP: $\beta = 1$

$$B_+ = \frac{1}{\gamma}\Big(B + \left(\frac{\gamma}{\rho} + \frac{c}{b}\right)\frac{1}{b}yy^T - \frac{1}{b}(Bdy^T + y(Bd)^T)\Big)$$

- BFGS: $\beta = 0$

$$B_+ = \frac{1}{\gamma}\left(B + \frac{\gamma}{\rho}\frac{1}{b}yy^T - \frac{1}{c}Bd(Bd)^T\right)$$

- R1: $\beta = (\gamma/\rho)/(\gamma/\rho - c/b)$:

$$B_+ = \frac{1}{\gamma}\left(B + \frac{\frac{\gamma}{\rho}}{\frac{\gamma}{\rho}b - c}\left(\frac{\gamma}{\rho}y - Bd\right)\left(\frac{\gamma}{\rho}y - Bd\right)^T\right)$$

Poznámka 44 (Součinový tvar) Nechť $H = SS^T$, $H_+ = S_+S_+^T$, $B = AA^T$, $B_+ = A_+A_+^T$. Nechť $d = S\tilde{d}$, $\tilde{d} = Ad$, $y = A^T\tilde{y}$, $\tilde{y} = S^Ty$, takže $a = \tilde{y}^T\tilde{y}$, $b = \tilde{y}^T\tilde{d}$, $c = \tilde{d}^T\tilde{d}$.

- DFP: $\eta = 0$, $\beta = 1$

$$\begin{aligned} S_+ &= \sqrt{\gamma}\left(S + \frac{1}{a}S\left(\sqrt{\frac{\rho}{\gamma}\frac{a}{b}}\tilde{d} - \tilde{y}\right)\tilde{y}^T\right) \\ A_+ &= \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left(A + \frac{1}{b}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{\rho}\frac{b}{a}}\tilde{y} - \tilde{d}\right)\tilde{y}^TA\right) \end{aligned}$$

- BFGS: $\eta = 1$, $\beta = 0$

$$\begin{aligned} S_+ &= \sqrt{\gamma}\left(S + \frac{1}{b}S\tilde{d}\left(\sqrt{\frac{\rho}{\gamma}\frac{b}{c}}\tilde{d} - \tilde{y}\right)^T\right) \\ A_+ &= \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left(A + \frac{1}{c}\tilde{d}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{\rho}\frac{c}{b}}\tilde{y} - \tilde{d}\right)^T A\right) \end{aligned}$$

Věta 73 *(Globální konvergence) Nechť $F : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1), (F3) a (F4). Pak metoda VM s výběrem délky kroku splňujícím slabou Wolfeho podmínkou (S2), (S3b) taková, že $1 \le \gamma_i \le \overline{\gamma}$, $0 < \underline{\rho} < \rho_i \le \overline{\rho}$, $0 < \underline{\eta} < \eta_i \le \overline{\eta}$, je globálně konvergentní.*

Poznámka 45 Globální konvergence vyžaduje splnění poměrně silné podmínky (F4) (stejnoměrná konvexita). Tuto podmínku lze oslabit modifikací výběru délky kroku nebo modifikací aktualizace VM matice. V praxi se to neprovádí, neboť VM metody (např. BFGS) jsou velmi robustní a efektní.

Poznámka 46 Zatím nikdo nedokázal, že (nemodifikovaná) DFP metoda je globálně konvergentní.

Věta 74 *(Superlineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů získaná VM metodou s $\gamma_i = \rho_i = 1$ taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je stacionárním bodem funkce $F \in C^2 : R^n \to R$, která vyhovuje podmínkám (F3)-(F5). Pokud $0 \le \eta_i \le 1$ a pokud $\alpha_i = 1$ jestliže tato hodnota vyhovuje podmínkám (S2) a (S3b), pak $x \to x^*$ Q-superlineárně.*

Poznámka 47 Věta 74 vyžaduje, aby platilo $\gamma_i = \rho_i = 1$. Ačkoliv není dokázána superlineární konvergence pro $\gamma_i \neq 1$, škálování obecně zlepšuje účinnost VM metody.

Věta 75 *(Kvadratické ukončení) Nechť $Q : R^n \to R$ je ryze konvexní kvadratická funkce a nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou VM s přesným výběrem délky kroku. Pak pro $1 \le j < i \le n+1$ platí*

$$\begin{aligned} H_i y_j &= \lambda_i^j d_j \\ s_j^T g_i &= 0 \\ s_j^T G s_i &= 0 \quad \textit{(sdruženost směrů)} \end{aligned}$$

Navíc existuje index $k \le n$ takový, že $g_{k+1} = 0$ a $x_{k+1} = x^*$.

Poznámka 48 Je-li výběr délky kroku přesný, jsou všechny metody VM ekvivalentní (generují stejné posloupnosti bodů a matic).

Algoritmus 4 (Metoda s proměnnou metrikou)

Data $\varepsilon_1 = 10^{-4}$, $\varepsilon_2 = 0.9$, $\underline{\varepsilon} > 0$, $\underline{\rho} = 0.01$, $\overline{\rho} = 100$, $\underline{\gamma} = 1.0$, $\overline{\gamma} = 6.0$.

K1: Zvolíme $x_1 \in R^n$ a s.p.d. matici H_1 (obvykle $H_1 := I$). **Set** $F_1 := F(x_1)$, $g_1 := g(x_1)$. **Set** $i := 1$.

K2: **If** $\|g_i\| \le \underline{\varepsilon}$ **stop**. **Set** $s_i := -H_i g_i$.

K3: Určíme délku kroku $\alpha_i > 0$ použitím algoritmu 1. **Set** $x_{i+1} := x_i + \alpha_i s_i$, $F_{i+1} := F(x_{i+1})$, $g_{i+1} := g(x_{i+1})$.

K4: **Set** $d_i := x_{i+1} - x_i$, $y_i := g_{i+1} - g_i$. Určíme parametr $\rho_i > 0$ podle poznámky 41. **If** $\rho_i < \underline{\rho}$ **or**$\rho_i > \overline{\rho}$ **set** $\rho_i := 1$. Určíme parametr $\gamma_i > 0$ podle poznámky 40 (pro metodu BFGS volíme $\gamma_i/\rho_i = b_i/a_i$). **If** $\gamma_i < \underline{\gamma}$ **or** $\gamma_i > \overline{\gamma}$ **set** $\gamma_i := 1$. Zvolíme parametr $\eta_i > 0$ a určíme matici H_{i+1} podle (H) (pro metodu BFGS volíme $\eta_i = 1$). **Set** $i := i + 1$, **go to** K2.

Metody s lokálně omezeným krokem

Budeme používat označení

$$Q_i(s) = g_i^T s + \frac{1}{2} s^T B_i s$$

(kvadratická aproximace $F(x_i + s) - F(x_i)$)

$$\omega_i(s) = (B_i s + g_i)/\|g_i\|$$

(přesnost určení směrového vektoru)

$$\rho_i(s) = \frac{F(x_i + s) - F(x_i)}{Q_i(s)}$$

(podíl skutečného a předpověděného poklesu funkce $F : R^n \to R$).

Definice 43 *Řekneme, že základní optimalizační metoda (Definice 34) je metodou s lokálně omezeným krokem, (trust region), jestliže se směrové vektory $s_i \in R^n$, $i \in N$, určují tak, že*

$$\|s_i\| \le \Delta_i \tag{T1a}$$

$$\|s_i\| < \Delta_i \quad \Rightarrow \quad \|\omega_i(s_i)\| \le \overline{\omega} \tag{T1b}$$

$$-Q_i(s_i) \ge \underline{\sigma}\|g_i\| \min(\|s_i\|, \|g_i\|/\|B_i\|) \tag{T1c}$$

kde $0 < \underline{\sigma} < 1$ a $0 \le \overline{\omega} < 1$, kde délky kroku $\alpha_i \ge 0$, $i \in N$, se vybírají tak, že

$$\rho_i(s_i) \le 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0 \tag{T2a}$$

$$\rho_i(s_i) > 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 1 \tag{T2b}$$

a kde čísla $0 < \Delta_i \le \overline{\Delta}$, $i \in N$, se volí tak, že

$$\rho_i(s_i) \le \underline{\rho} \quad \Rightarrow \quad \underline{\beta}\|s_i\| \le \Delta_{i+1} \le \overline{\beta}\|s_i\| \tag{T3a}$$

$$\rho_i(s_i) \ge \underline{\rho} \quad \Rightarrow \quad \|s_i\| \le \Delta_{i+1} \le \min(\overline{\gamma}\|s_i\|, \overline{\Delta}) \tag{T3b}$$

kde $0 < \underline{\beta} \le \overline{\beta} < 1 < \overline{\gamma}$ a $0 < \underline{\rho} < 1$ (číslo $\overline{\Delta} > 0$ slouží k tomu, abychom se nedostali mimo definiční obor funkce F).

Poznámka 49 Jestliže $\overline{\omega} = 0$ nebo $\overline{\omega} > 0$, dostaneme přesné nebo nepřesné metody s lokálně omezeným krokem.

Poznámka 50 Normy v (T1) a (T3) mohou být i jiné než euklidovské. Některé nerovnosti v (T1)–(T3) mohou být upraveny (oslabeny nebo zesíleny).

Věta 76 *(Globální konvergence) Nechť funkce $F \in C^2 : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3). Pak metoda s lokálně omezeným krokem je globálně konvergentní, jestliže platí*

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{M_i} = \infty,$$

kde $M_i = \max_{1 \le j \le i} \|B_j\|$.

Poznámka 51 Podmínka $\sum_{i=1}^{\infty} 1/M_i = \infty$ použitá ve větě 76 je mnohem slabší než podmínka $\sum_{i=1}^{\infty} 1/\kappa(B_i) = \infty$ použitá v poznámce 24 (matice B_i nemusí být pozitivně definitní ani dostatečně dobře podmíněná). Předpoklady věty 76 jsou splněny například tehdy, jsou-li matice B_i, $i \in N$, stejnoměrně omezené, tedy

$$\|B_i\| \le \overline{B} \quad \forall i \in N$$

Věta 77 *(Superlineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou s lokálně omezeným krokem taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je stacionárním bodem funkce $F \in C^2 : R^n \to R$, která vyhovuje podmínkám (F3) a (F4). Nechť*

$$\lim_{i \to \infty} \omega_i = 0$$

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\|(B_i - G_i)s_i\|}{\|s_i\|} = 0$$

Pak $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.

Metody s optimálním lokálně omezeným krokem

Definice 44 *Metody s optimálním lokálně omezeným krokem používají směrové vektory*

$$s_i = \arg\min_{\|s\| \le \Delta_i} Q_i(s) \tag{$\overline{\mathrm{T}}1$}$$

přičemž $\|s_i\| = \Delta_i$*, není-li toto minimum jediné.*

Věta 78 *Vektor* $s_i \in R^n$ *určený podle* ($\overline{\mathrm{T}}1$) *vyhovuje podmínkám* (T1) *s* $\overline{\omega} = 0$ *a* $\underline{\sigma} = 1/2$.

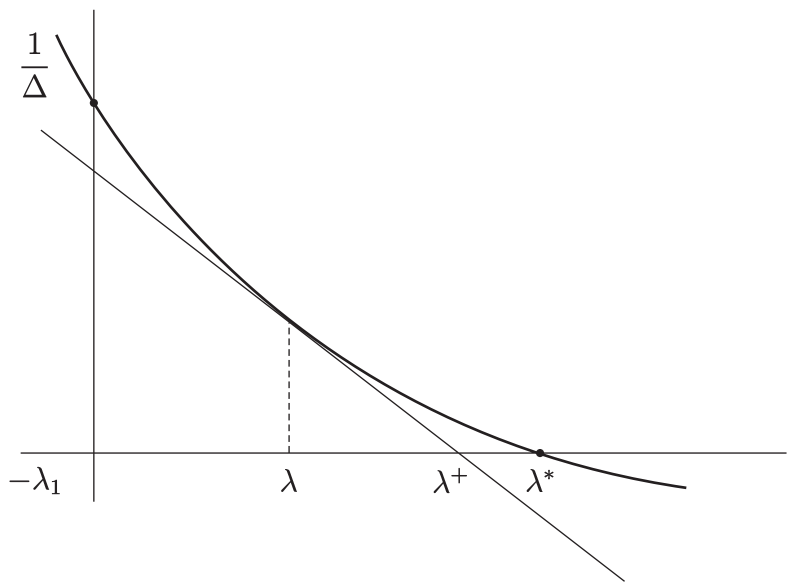
Věta 79 *Vektor* $s_i \in R^n$ *je řešením* ($\overline{\mathrm{T}}1$) *právě tehdy, jestliže* $\|s_i\| \le \Delta_i$ *a jestliže existuje číslo* $\lambda_i \ge 0$ *takové, že matice* $B_i + \lambda_i I$ *je positivně semidefinitní a platí* $(B_i + \lambda_i I)s_i + g_i = 0$ *a* $(\|s_i\| - \Delta_i)\lambda_i = 0$.

Poznámka 52 Je-li matice B_i s.p.d. a $\|B_i^{-1} g_i\| \le \Delta$, pokládáme $s_i = -B_i^{-1} g_i$. Jinak řešíme nelineární rovnici

$$\varphi(\lambda) = \frac{1}{\Delta_i} - \frac{1}{\|s_i(\lambda)\|} = 0$$

kde

$$(B_i + \lambda I)s_i(\lambda) + g_i = 0$$



Algoritmus 5 *(určení optimálního lokálně omezeného kroku)*

Data: $0 < \underline{\delta} < 1 < \overline{\delta}$, $\Delta > 0$

K1: **Set** $\underline{\gamma} := \max_{1 \le i \le n}(-B_{ii})$. **Set** $\underline{\lambda} := 0$, $\overline{\lambda} := \|g\|/\Delta + \|B\|$ *a* $\lambda := \max(\underline{\gamma}, \underline{\lambda})$.

K2: **Set** $\underline{\lambda} := \max(\underline{\gamma}, \underline{\lambda})$. **If** $\lambda < \underline{\lambda}$ **set**$\lambda := \sqrt{\underline{\lambda}\overline{\lambda}}$.

K3: **If** $B + \lambda I$ *je s.p.d., určíme rozklad* $R^T R = B + \lambda I$ *(R je horní trojúhelníková) a* **go to** *K4.* **If** $B + \lambda I$ *není s.p.d., určíme* $v \in R^n$ *tak, že* $\|v\| = 1$ *a* $v^T(B + \lambda I)\, v \le 0$, **set** $\underline{\gamma} := \lambda - v^T(B + \lambda I)v$ *a* **go to** *K2.*

K4: **Set** $s := -(R^T R)^{-1} g$. **If** $\|s\| > \overline{\delta}\Delta$, **set** $\underline{\lambda} := \lambda$ *a* **go to** *K6.* **If** $\underline{\delta}\Delta \le \|s\| \le \overline{\delta}\Delta$ **stop** $(s_i = s)$. **If** $\|s\| < \underline{\delta}\Delta$ *a* $\lambda = 0$ **stop** $(s_i = s)$. **If** $\|s\| < \underline{\delta}\Delta$ *a* $\lambda \neq 0$, **set** $\overline{\lambda} := \lambda$ *a* **go to** *K5.*

K5: Určíme $v \in R^n$ jako aproximaci vlastního vektoru matice B příslušného vlastnímu číslu $\underline{\lambda}(B)$ tak, že $\|v\| = 1$ a $v^T s > 0$. Určíme $\alpha \ge 0$ tak, že $\|s + \alpha v\| = \Delta$.
If $\alpha^2 \|Rv\|^2 \le (1 - \underline{\delta}^2)(\|Rs\|^2 + \lambda\Delta^2)$ **set** $s := s + \alpha v$ *a* **stop** $(s_i = s)$.
If $\alpha^2 \|Rv\|^2 > (1 - \underline{\delta}^2)(\|Rs\|^2 + \lambda\Delta^2)$ **set** $\underline{\gamma} := \lambda - \|Rv\|^2$ *a* **go to** *K6.*

K6: **Set** $v := (R^T)^{-1} s$ *a*

$$\lambda := \lambda + \frac{\|s\|^2}{\|v\|^2} \left(\frac{\|s\| - \Delta}{\Delta} \right)$$

If $\lambda < \underline{\lambda}$, **set** $\lambda := \underline{\lambda}$. **If** $\lambda > \overline{\lambda}$, **set** $\lambda := \overline{\lambda}$. **Go to** *K2.*

Poznámka 53 Vektor $v \in R^n$, použitý v kroku K5, lze určit pomocí programů z knihovny LAPACK; číslo $\alpha \ge 0$ takové, že $\|s + \alpha v\| = \Delta$ se určí podle vzorce

$$\alpha = -v^T s + \sqrt{(v^T s)^2 + \Delta^2 - \|s\|^2} = \frac{\Delta^2 - \|s\|^2}{v^T s + \sqrt{(v^T s)^2 + \Delta^2 - \|s\|^2}}$$

Poznámka 54 Rozklad $R^T R = B + \lambda I$ v kroku K3 se provádí průměrně 2-3 krát v každé iteraci. Proto se někdy používá směrový vektor

$$s_i = \arg \min_{\|s(\alpha,\beta)\| \le \Delta_i} Q_i(s(\alpha, \beta)),$$

kde

$$s(\alpha, \beta) = \alpha g_i + \beta B_i^{-1} g_i.$$

Tato úloha má dimenzi 2 a rozklad matice $R^T R = B + \lambda I$ se provádí pouze jednou v každé iteraci.

Nepřesné metody s lokálně omezeným krokem

Aplikujeme-li metodu CG na kvadratickou funkci

$$Q(s) = g^T s + \frac{1}{2} s^T B s,$$

platí (Algoritmus 3 s $g = -r$) $s_1 = 0$, $g_1 = g$, $p_1 = -g$ a

$$\begin{aligned} q_j &= B p_j, \\ \alpha_j &= g_j^T g_j / p_j^T q_j \\ s_{j+1} &= s_j + \alpha_j p_j \\ g_{j+1} &= g_j + \alpha_j q_j \\ \beta_j &= g_{j+1}^T g_{j+1} / g_j^T g_j \\ p_{j+1} &= -g_{j+1} + \beta_j p_j \end{aligned}$$

pro $1 \le j \le n$.

Poznámka 55 Aplikujeme-li metodu CG na kvadratickou funkci $Q(s)$ a je-li $p_j^T B p_j > 0$, $1 \le j \le m \le n$, pak pro $1 \le j \le m$ platí

$$\begin{aligned} Q(s_{j+1}) &< Q(s_j) \\ \|s_{j+1}\| &> \|s_j\| \end{aligned}$$

(věta 68) a

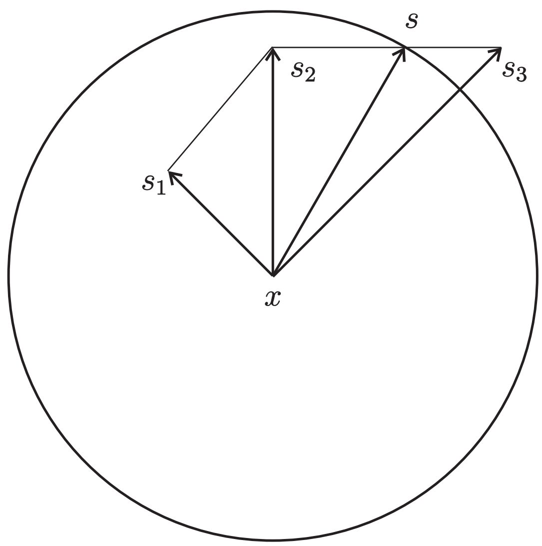
$$Q(s_{j+1}) \le -\frac{1}{2}\|g\|^2/\|B\|$$

(věta 69).

Poznámka 56 Pokud $p_j^T B p_j \le 0$ nebo $\|s_j\| < \Delta$ a $\|s_{j+1}\| \ge \Delta$, položíme $s = s_j + \alpha_j p_j$, kde $\alpha_j > 0$ je hodnota taková, že $\|s_j + \alpha_j p_j\| = \Delta$, neboli

$$\alpha_j = \frac{\sqrt{(p_j^T s_j)^2 + (\Delta^2 - \|s_j\|^2)\|p_j\|^2} - p_j^T s_j}{\|p_j\|^2}.$$

Pak pro $j \ge 2$ platí $Q(s) \le -(1/2)\|g\|^2/\|B\|$ a pro $j = 1$ platí $Q(s) \le -(1/2)\|g\|\|s\|$, takže je splněna podmínka (T1c) s $\underline{\sigma} = 1/2$.



Algoritmus 6 *(určení nepřesného lokálně omezeného kroku)*

Data: $0 < \omega < 1$, $\Delta > 0$.

K1: **Set** $s := 0$, $r := -g$, $p := r$, $\sigma := \|r\|^2$.

K2: **Set** $\rho := \sigma$, $q := Bp$, $\delta := p^T q$. **If** $\delta \le 0$ **set**

$$\alpha = (\sqrt{(p^T s)^2 + (\Delta^2 - \|s\|^2)\|p\|^2} - p^T s)/\|p\|^2$$

$s := s + \alpha p$ *a* **stop** $(s_i = s)$. **If** $\delta > 0$ **go to** *K3.*

K3: **Set** $\alpha = \rho/\delta$. **If** $\|s + \alpha p\| \ge \Delta$ **set**

$$\alpha = (\sqrt{(p^T s)^2 + (\Delta^2 - \|s\|^2)\|p\|^2} - p^T s)/\|p\|^2$$

$s := s + \alpha p$ *a* **stop** $(s_i = s)$. **If** $\|s + \alpha p\| < \Delta$ **go to** *K4.*

K4: **Set** $s := s + \alpha p$, $r := r - \alpha q$, $\sigma := \|r\|^2$.
If $\sigma \le \omega^2 \|g\|^2$ **stop** $(s_i = s)$. **If** $\sigma > \omega^2 \|g\|^2$ **set** $\beta := \sigma/\rho$, $p := r + \beta p$ *a* **go to K2**.

Metody psí nohy

Metody psí nohy kombinují směr největšího spádu se směrem Newtonovy metody

$$\begin{aligned} s_C &= -\frac{g^T g}{g^T B g} g \\ s_N &= -B^{-1} g \end{aligned}$$

Algoritmus 7 *(metoda psí nohy)*

Data: $\Delta > 0$.

K1: **If** $g^T B g \le 0$ *nebo* $\|s_C\| \ge \Delta$, **set** $s := -(\Delta/\|g\|)g$ *a* **stop** $(s_i = s)$.

K2: **If** B *je singulární, určíme vektor* $v \in R^n$ *tak, že* $\|v\| = 1$, $v^T B v \le 0$, $v^T(g + B s_C) \le 0$ *a* **go to** *K4*. **If** B *není singulární, vypočteme* s_N. **If** $s_N = s_C$ **set** $s := s_N$ *a* **stop** $(s_i = s)$.

K3: **If** $(s_N - s_C)^T s_C \le 0$ **set**

$$v := -\frac{s_N - s_C}{\|s_N - s_C\|}$$

a **go to** *K4*. **If** $(s_N - s_C)^T s_C > 0$ *a* $\|s_N\| > \Delta$ **set**

$$v := +\frac{s_N - s_C}{\|s_N - s_C\|}$$

a **go to** *K4*. **If** $(s_N - s_C)^T s_C > 0$ *a* $\|s_N\| \le \Delta$ **set** $s := s_N$ *a* **stop** $(s_i = s)$.

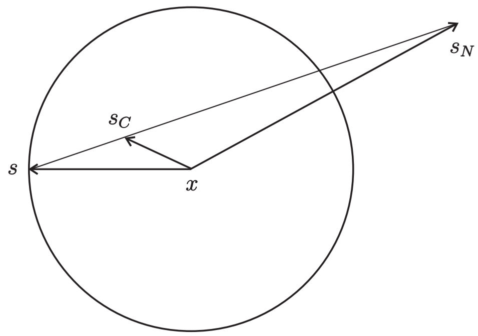
K4: **Set**

$$\alpha := \frac{\Delta^2 - \|s_C\|^2}{v^T s_C + \sqrt{(v^T s_C)^2 + \Delta^2 - \|s_C\|^2}}$$

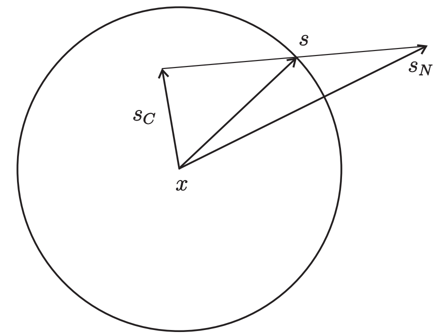
pokud $v^T s_C \ge 0$ *nebo*

$$\alpha := -v^T s_C + \sqrt{(v^T s_C)^2 + \Delta^2 - \|s\|^2}$$

pokud $v^T s_C < 0$, **set** $s := s_C + \alpha v$ *a* **stop** $(s_i = s)$.



$(s_N - s_C)^T s_C \le 0$



$(s_N - s_C)^T s_C > 0$

Newtonova metoda

Newtonova metoda používá matice $B_i = G(x_i)$, $i \in N$, takže z podmínky (F3) plyne $\|B_i\| = \|G(x_i)\| \le \overline{G}$, $i \in N$.

Věta 80 *Nechť funkce $F \in C^2 : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1) a (F3). Pak Newtonova metoda s lokálně omezeným krokem je globálně konvergentní. Je-li navíc splněna podmínka (F4) a platí-li $x_i \to x^*$ a $\omega_i(s_i) \to 0$, pak $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.*

Poznámka 57 Realizace Newtonovy metody

- Nepřesná Newtonova metoda: Soustava $B_i s_i = -g_i$ se řeší nepřesně ($\omega_i(s_i) > 0$) metodou CG, takže je třeba méně než $O(n^3)$ operací na iteraci. Obvykle

$$\overline{\omega}_i = \min(\overline{\omega}, \|g_i\|, 1/i).$$

- Newtonova metoda s optimálním lokálně omezeným krokem.

Věta 81 *Nechť funkce $F \in C^2 : R^n \to R$ splňuje podmínky (F1)-(F3) a $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost generovaná Newtonovou metodou s optimálním lokálně omezeným krokem. Pak existuje hromadný bod $x^* \in R^n$ posloupnosti $\{x_i\} \subset R^n$ takový, že $g(x^*) = 0$ a $G(x^*) \succeq 0$ (positivně semidefinitní). Jestliže bod x^* vyhovuje postačujícím podmínkám pro extrém (Věta 51: $g(x^*) = 0$, $G(x^*) \succ 0$), pak x^* je jediným hromadným bodem posloupnosti $\{x_i\} \subset R^n$ a $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.*

Gaussova metoda pro součet čtverců

Definice 45 *Řekneme, že funkce $F : R^n \to R$ je součtem čtverců, jestliže existuje zobrazení $f : R^n \to R^m$, $m \ge n$, takové, že*

$$F(x) = \frac{1}{2} f^T(x) f(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} f_k^2(x)$$

Poznámka 58 Je-li $F : R^n \to R$ součtem čtverců, platí

$$\begin{aligned} g(x) &= J^T(x) f(x) = \sum_{k=1}^{m} f_k(x) g_k(x) \\ G(x) &= J^T(x) J(x) + C(x) = \sum_{k=1}^{m} g_k(x) g_k^T(x) + \sum_{k=1}^{m} f_k(x) G_k(x) \end{aligned}$$

kde $g_k(x) = \nabla f_k(x)$, $G_k(x) = \nabla^2 f_k(x)$ a

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \ldots, & \ldots, & \ldots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

Gaussovu-Newtonovu (GN) metodu pro součet čtverců dostaneme z Newtonovy metody zanedbáním členu

$$C(x) = \sum_{k=1}^{m} f_k(x) G_k(x)$$

v Hessově matici. Tedy $B_i s_i = -g_i$, $i \in N$, kde

$$B_i = J_i^T J_i = \sum_{k=1}^{m} g_k(x_i) g_k^T(x_i)$$

Zdůvodnění:

- Úlohy s nulovým reziduem $F(x^*) = 0$. Z $x_i \to x^*$ plyne $F(x_i) \to F(x^*) = 0$, takže $f_k(x_i) \to 0$, $1 \le k \le m$. Jestliže $\|G_k(x_i)\| \le \overline{G}$, $1 \le k \le m$, pak

$$\|C(x_i)\| = \left\| \sum_{k=1}^{m} f_k(x_i) G_k(x_i) \right\| \le \overline{G} \sum_{k=1}^{m} |f_k(x_i)| \to 0$$

  a tedy $\|G(x_i) - B_i\| = \|C(x_i)\| \to 0$ z čehož plyne Q-superlineární konvergence.

- Linearizace. Platí

$$\begin{aligned} F(x_i + s) &= \frac{1}{2} f^T(x_i + s) f(x_i + s) \\ &\approx \frac{1}{2} (f(x_i) + J(x_i)s)^T (f(x_i) + J(x_i)s) \\ &= \frac{1}{2} f^T(x_i) f(x_i) + f^T(x_i) J(x_i) s + \frac{1}{2} s^T J^T(x_i) J(x_i) s \end{aligned}$$

  takže

$$F(x_i + s) - F(x_i) \approx g^T(x_i) s + \frac{1}{2} s^T B_i s$$

  což je lokální kvadratická aproximace s maticí $B_i = J_i^T J_i$.

Poznámka 59 Podmínku (F3) nahradíme omezeností druhých derivací funkcí $f_k(x)$. Tedy

$$\|G_k(x)\| \le \overline{G} \quad \forall x \in R^n, \quad 1 \le k \le m \qquad (\overline{\text{F3}}).$$

Poznámka 60 Podmínka (F1) je splněna vždy, neboť $F(x) \ge 0 \; \forall x \in R^n$. Podmínky (F2) a $(\overline{\text{F3}})$ implikují $\|f_k(x)\| \le \overline{f}$ a $\|g_k(x)\| \le \overline{g} \; \forall x \in R^n$, $1 \le k \le m$, a tudíž podmínku (F3).

Věta 82 *Nechť funkce $f_k(x) : R^n \to R$, $1 \le k \le m$, splňují podmínky (F2) a $(\overline{\text{F3}})$. Pak GN metoda s lokálně omezeným krokem je globálně konvergentní. Je-li navíc splněna podmínka (F4) a platí-li $x_i \to x^*$, $F(x^*) = 0$ a $\omega_i(s_i) \to 0$, pak $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.*

Poznámka 61 Výpočet směrového vektoru.

- Řešením normální soustavy rovnic

$$J_i^T J_i s_i + J_i^T f_i = 0$$

- Řešením linearizované úlohy nejmenších čtverců (přeurčené soustavy lineárních rovnic)

$$J_i s_i + f_i \approx 0$$

Používá se QR rozklad

$$J_i = Q_i \begin{bmatrix} R_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad Q_i^T Q_i = I$$

(R_i je horní trojúhelníková matice). Při realizaci GN metody s optimálním lokálně omezeným krokem můžeme soustavu $(J_i^T J_i + \lambda I)s + J_i^T f_i = 0$ nahradit linearizovanou úlohou

$$\begin{bmatrix} J_i \\ \sqrt{\lambda} I \end{bmatrix} s + \begin{bmatrix} f_i \\ 0 \end{bmatrix} \approx 0$$

- Řešením systémových rovnic. Označíme $r_i = -(J_i s_i + f_i)$. Směrový vektor hledáme tak, aby platilo $J_i^T r_i = 0$. Tedy

$$\begin{bmatrix} I & J_i \\ J_i^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_i \\ s_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_i \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

  což je soustava $m+n$ rovnic se symetrickou indefinitní maticí (KKT systém, rovnice sedlového bodu). Vhodné pro řídké nebo pro vážené úlohy.

Hybridní metody pro součet čtverců

Myšlenka:

$$\begin{aligned} F_i \to F^* = 0 \quad &\Rightarrow \quad \text{GN metoda} \\ F_i \to F^* > 0 \quad &\Rightarrow \quad \text{VM metoda} \end{aligned}$$

Věta 83 *Nechť $F_i \to F^* = 0$ Q-superlineárně. Pak*

$$\lim_{i\to\infty} \frac{F_i - F_{i+1}}{F_i} = 1$$

Nechť $F_i \to F^* > 0$. Pak

$$\lim_{i\to\infty} \frac{F_i - F_{i+1}}{F_i} = 0$$

Hybridní metoda:

Nechť $B_1 = J_1^T J_1$. Pro $i \in N$ pokládáme

$$\begin{aligned} B_{i+1} &= J_{i+1}^T J_{i+1}, & F_i - F_{i+1} > \underline{\vartheta} F_i \\ B_{i+1} &= B_i + \frac{y_i y_i^T}{y_i^T d_i} - \frac{B_i d_i (B_i d_i)^T}{d_i^T B_i d_i}, & F_i - F_{i+1} \le \underline{\vartheta} F_i \end{aligned}$$

kde $d_i = x_{i+1} - x_i$, $y_i = g_{i+1} - g_i$ (obvykle $\underline{\vartheta} = 0.01$).

Vektorové diferenční verze Newtonovy metody

Vektorové diferenční verze Newtonovy metody jsou nepřesné metody s lokálně omezeným krokem (Algoritmus 4), kde se násobení maticí $B = G$ nahradí numerickým výpočtem derivací

$$q = G(x)p \approx \frac{g(x + \delta p) - g(x)}{\delta}$$

kde $\delta = \sqrt{\varepsilon_M}\|p\|$ (ε_M je strojová přesnost).

Poznámka 62 Vlastnosti:

- Pro nestrukturované úlohy většinou efektivní.
- Pro špatně podmíněné úlohy příliš velký počet gradientů.

Maticové diferenční verze Newtonovy metody

Předpokládáme, že matice $G(x)$ je řídká (málo strukturálně nenulových prvků). Je-li matice $G(x)$ řídká, lze obvykle vypočítat několik sloupců této matice pomocí jedné diference gradientů.

Příklad 6 *Nechť*

$$G = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & 0 & 0 & 0 \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & 0 & 0 \\ 0 & G_{32} & G_{33} & G_{34} & 0 \\ 0 & 0 & G_{43} & G_{44} & G_{45} \\ 0 & 0 & 0 & G_{54} & G_{55} \end{bmatrix}$$

a

$$\begin{aligned} v_1 &= \begin{bmatrix} 1, & 0, & 0, & 1, & 0 \end{bmatrix}^T \\ v_2 &= \begin{bmatrix} 0, & 1, & 0, & 0, & 1 \end{bmatrix}^T \\ v_3 &= \begin{bmatrix} 0, & 0, & 1, & 0, & 0 \end{bmatrix}^T \end{aligned}$$

Pak

$$\begin{aligned} Gv_1 &= \begin{bmatrix} G_{11}, & G_{21}, & G_{34}, & G_{44}, & G_{54} \end{bmatrix}^T \\ Gv_2 &= \begin{bmatrix} G_{12}, & G_{22}, & G_{32}, & G_{45}, & G_{55} \end{bmatrix}^T \\ Gv_3 &= \begin{bmatrix} 0, & G_{23}, & G_{33}, & G_{43}, & 0 \end{bmatrix}^T \end{aligned}$$

takže všechny prvky matice G lze určit pomocí tří diferenčních vzorců

$$\begin{aligned} \frac{g(x + \delta v_1) - g(x)}{\delta} &\approx Gv_1 \\ \frac{g(x + \delta v_2) - g(x)}{\delta} &\approx Gv_2 \\ \frac{g(x + \delta v_3) - g(x)}{\delta} &\approx Gv_3 \end{aligned}$$

Poznámka 63 Je-li matice $G(x)$ velmi řídká, patří diferenční verze Newtonovy metody pro řídké úlohy k nejefektivnějším metodám.

Metody pro separovatelné úlohy

Separovatelná úloha:

$$F(x) = \sum_{k=1}^{m} f_k(x)$$

kde $m = O(n)$ a $f_k : R^n \to R$, $1 \le k \le m$, závisí na $n_k = O(1)$ proměnných. Platí

$$\begin{aligned} g(x) &= \sum_{k=1}^{m} g_k(x) \\ G(x) &= \sum_{k=1}^{m} G_k(x) \end{aligned}$$

kde $g_k(x)$ a $G_k(x)$ obsahují $O(1)$ nenulových prvků.

Označení:

N_k – množina indexů proměnných funkce $f_k(x)$ (má n_k prvků).

$Z_k \in R^{n \times n_k}$ – matice obsahující sloupce jednotkové matice s indexy z N_k.

$\hat{g}_k = Z_k^T g_k \in R^{n_k}$ – redukované gradienty

$\hat{G}_k = Z_k^T G_k Z_k \in R^{n_k \times n_k}$ – redukované Hessovy matice

Příklad 7

$$\begin{aligned} F(x) &= (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{n} (x_i - x_{i-1})^2 \\ f_1(x) &= (x_1 - 1)^2 \\ f_i(x) &= (x_i - x_{i-1})^2, \quad 2 \le i \le n \end{aligned}$$

$$Z_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad Z_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \dots, \quad Z_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{g}_1 = \begin{bmatrix} 2(x_1 - 1) \end{bmatrix}, \qquad \hat{G}_1 = \begin{bmatrix} 2 \end{bmatrix}$$

$$\hat{g}_i = \begin{bmatrix} -2(x_i - x_{i-1}) \\ 2(x_i - x_{i-1}) \end{bmatrix}, \qquad \hat{G}_i = \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$$

Diferenční verze Newtonovy metody pro separovatelné úlohy

Redukované Hessovy matice se počítají numericky pomocí diferencí redukovaných gradientů

$$\hat{G}_k(x)\hat{e}_j \approx \frac{\hat{g}_k(x+\delta Z_k\hat{e}_j)-\hat{g}_k(x)}{\delta}$$

kde $\hat{e}_j$, $1 \le j \le n_k$, jsou sloupce jednotkové matice řádu n_k. K určení prvků všech redukovaných Hessových matic je zapotřebí

$$\sum_{k=1}^{m} n_k^2 = mO(1) = O(n)$$

operací. Výsledná Hessova matice

$$G(x) = \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{G}_k(x)Z_k^T$$

Metody s proměnnou metrikou pro separovatelné úlohy

Místo redukovaných Hessových matic se používají jejich aproximace $\hat{B}_k$, $1 \le k \le m$, které se aktualizují pomocí metod s proměnnou metrikou

$$\hat{B}_k^+ = \frac{1}{\hat{\gamma}_k}\left(\hat{B}_k + \frac{\hat{\gamma}_k}{\hat{\rho}_k}\frac{1}{\hat{b}_k}\hat{y}_k\hat{y}_k^T - \frac{1}{\hat{c}_k}\hat{B}_k\hat{d}_k(\hat{B}_k\hat{d}_k)^T + \frac{\hat{\beta}_k}{\hat{c}_k}\left(\frac{\hat{c}_k}{\hat{b}_k}\hat{y}_k - \hat{B}_k\hat{d}_k\right)\left(\frac{\hat{c}_k}{\hat{b}_k}\hat{y}_k - \hat{B}_k\hat{d}_k\right)^T\right)$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{d}_k &= Z_k^T d\,, \\ \hat{y}_k &= Z_k^T(g_k^+ - g_k) = \hat{g}_k^+ - \hat{g}_k\,, \end{aligned}$$

$\hat{b}_k = \hat{y}_k^T\hat{d}_k$, $\hat{c}_k = \hat{d}_k^T\hat{B}_k\hat{d}_k$ a $\hat{\gamma}_k$, $\hat{\rho}_k$, $\hat{\beta}_k$ jsou volené parametry ($\hat{\beta}_k = 0$ pro metodu BFGS). Aproximace Hessovy matice

$$B = \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{B}_kZ_k^T$$

Směrový vektor se získá řešením soustavy rovnic $Bs = -g$, kde

$$g = \sum_{k=1}^{m} g_k = \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{g}_k$$

Poznámka 64 Nelze zaručit, aby platilo $\hat{b}_k = \hat{y}_k^T\hat{d}_k > 0\ \forall 1 \le k \le m \Rightarrow$ některá z matic $\hat{B}_k$ nemusí být positivně definitní $\Rightarrow B$ nemusí být positivně definitní $\Rightarrow$ nelze dokázat globální konvergenci pro metodu spádových směrů.

Věta 84 *(Superlineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost získaná VM metodou pro separovatelné úlohy s $\gamma_k^i = \rho_k^i = 1$, $1 \le k \le m$, $\forall i \in N$, taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je stacionární bod funkce $F \in C^2 : R^n \to R$, která vyhovuje podmínkám (F3)-(F5). Pokud $0 \le \eta_k^i \le 1$, $1 \le k \le m$, $\forall i \in N$, a pokud $\alpha_i = 1$, jestliže tato hodnota splňuje podmínku (S2) a (S3b), pak $x \to x^*$ Q-superlineárně.*

Poznámka 65 Metody s proměnnou metrikou pro separovatelné úlohy jsou obvykle velmi efektivní. Je výhodné kombinovat metodou BFGS

$$\begin{aligned} \hat{B}_k^+ &= \hat{B}_k + \frac{1}{\hat{b}_k}\hat{y}_k\hat{y}_k^T - \frac{1}{\hat{c}_k}\hat{B}_k\hat{d}_k(\hat{B}_k\hat{d}_k)^T, & \hat{b}_k > 0 \\ \hat{B}_k^+ &= \hat{B}_k, & \hat{b}_k \le 0 \end{aligned}$$

s metodou hodnosti 1

$$\begin{aligned} \hat{B}_k^+ &= \hat{B}_k + \frac{1}{\hat{b}_k - \hat{c}_k}(\hat{y}_k - \hat{B}_k\hat{d}_k)(\hat{y}_k - \hat{B}_k\hat{d}_k)^T, & |\hat{b}_k - \hat{c}_k| \neq 0 \\ \hat{B}_k^+ &= \hat{B}_k, & |\hat{b}_k - \hat{c}_k| = 0 \end{aligned}$$

Na metodu hodnosti 1 přecházíme, pokud z hodnot b_k, $1 \le k \le m$, je alespoň $m/2$ nekladných.

Gaussova-Newtonova metoda pro separovatelný součet čtverců

Uvažujme součet čtverců

$$F(x) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m} f_k^2(x)$$

kde $m = O(n)$ a $f_k : R^n \to R$, $1 \le k \le m$, závisí na $n_k = O(1)$ proměnných. Platí

$$g(x) = \sum_{k=1}^{m} f_k(x)g_k(x) = \sum_{k=1}^{m} f_k(x)Z_k\hat{g}_k(x)$$

$$B(x) = J^T(x)J(x) = \sum_{k=1}^{m} g_k(x)g_k^T(x) = \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{g}_k(x)\hat{g}_k^T(x)Z_k^T = \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{B}_k(x)Z_k^T$$

kde $\hat{B}_k(x) = \hat{g}(x)\hat{g}_k^T(x)$ je redukovaná Gaussova-Newtonova matice. V každé iteraci se řeší soustava rovnic $B(x_i)s_i = -g(x_i)$.

Hybridní metody pro separovatelný součet čtverců

- Kombinace GN metody s Newtonovou metodou pro separovatelné úlohy:
  Nechť $\hat{B}_k^1 = \hat{g}_k^1(\hat{g}_k^1)^T$, $1 \le k \le m$. Pro $i \in N$ pokládáme

  $$\begin{aligned} \hat{B}_k^{i+1} &= \hat{g}_k^{i+1}(\hat{g}_k^{i+1})^T, & F_i - F_{i+1} > \underline{\vartheta}F_i \\ \hat{B}_k^{i+1} &= \hat{g}_k^{i+1}(\hat{g}_k^{i+1})^T + f_k^{i+1}\hat{C}_k^{i+1}, & F_i - F_{i+1} \le \underline{\vartheta}F_i \end{aligned}$$

  Dále pokládáme

  $$\begin{aligned} B_i &= \sum_{k=1}^{m} Z_k\hat{B}_k^iZ_k^T \\ g_i &= \sum_{k=1}^{m} f_k^iZ_k\hat{g}_k^i \end{aligned}$$

  a řešíme soustavu rovnic $B_is_i = -g_i$.

- Kombinace GN metody s VM metodou hodnosti 1:
  Nechť $\hat{B}_k^1 = \hat{g}_k^1(\hat{g}_k^1)^T$ a $\hat{C}_k^1 = I$, $1 \le k \le m$. Pro $i \in N$ pokládáme

$$\begin{aligned} \hat{C}_k^{i+1} &= \hat{C}_k^i + \frac{\hat{w}_k^i(\hat{w}_k^i)^T}{(\hat{d}_k^i)^T\hat{w}_k^i}, & |(\hat{d}_k^i)^T\hat{w}_k^i| > \underline{\delta} \\ \hat{C}_k^{i+1} &= \hat{C}_k^i, & |(\hat{d}_k^i)^T\hat{w}_k^i| \le \underline{\delta} \end{aligned}$$

  a

$$\begin{aligned} \hat{B}_k^{i+1} &= \hat{g}_k^{i+1}(\hat{g}_k^{i+1})^T, & F_i - F_{i+1} > \underline{\vartheta} F_i \\ \hat{B}_k^{i+1} &= \hat{g}_k^{i+1}(\hat{g}_k^{i+1})^T + f_k^{i+1}\hat{C}_k^{i+1}, & F_i - F_{i+1} \le \underline{\vartheta} F_i \end{aligned}$$

  kde $\hat{d}_k^i = Z_k^T(x_{i+1} - x_i)$, $\hat{y}_k^i = Z_k^T(g_{i+1} - g_i)$ a $\hat{w}_k^i = \hat{y}_k^i - \hat{C}_k^i\hat{d}_k^i$.

Poznámka 66 Hybridní metody pro separovatelný součet čtverců jsou superlineárně konvergentní. Jsou-li realizovány jeho metody s lokálně omezeným krokem, jsou globálně konvergentní.

Metody s proměnnou metrikou s omezenou pamětí (vektorový tvar)

Myšlenka:

V i-tém iteračním kroku položíme $H_1 = I$ a pomocí (nejvýše) m dvojic vektorů d_{i-m}, y_{i-m}, $\dots, d_{i-1}, y_{i-1}$ konstruujeme vektory $H_1 g_i, \dots, H_{m+1} g_i$ (matice $H_1, \dots, H_{m+1}$ se neukládají). Nakonec pokládáme $s_i = -H_{m+1} g_i$ (m je obvykle malé).

Definice 46 *Jsou-li matice $H_1, \dots, H_{m+1}$ získány metodou s proměnnou metrikou, budeme mluvit o metodě s proměnnou metrikou s omezenou pamětí (m-krokovou metodou s proměnnou metrikou).*

Poznámka 67 Pro jednoduchost budeme předpokládat, že $i \le m+1$ a že matice $H_1, \dots, H_i$ jsou konstruovány z vektorů $d_1, y_1, \dots, d_{i-1}, y_{i-1}$ pomocí metody BFGS, jejíž aktualizaci lze zapsat ve tvaru

$$H_{k+1} = \gamma_k V_k^T H_k V_k + \frac{\rho_k}{b_k} d_k d_k^T$$

$1 \le k \le i$, kde $V_k = I - y_k d_k^T / b_k$ a $b_k = y_k^T d_k$ ($d_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = g_{k+1} - g_k$). Dále budeme předpokládat, že $\gamma_k = 1$ pro $k > 1$.

Věta 85 *Pro m-krokovou metodu BFGS platí*

$$H_{k+1} = \gamma_1 \left(\prod_{j=1}^{k} V_j\right)^T \left(\prod_{j=1}^{k} V_j\right) + \sum_{l=1}^{k} \frac{\rho_l}{b_l} \left(\prod_{j=l+1}^{k} V_j\right)^T d_l d_l^T \left(\prod_{j=l+1}^{k} V_j\right)$$

(Předpokládáme, že $1 \le k \le m$).

Věta 86 *(Strangova formule) Vektor $s_i = -H_i g_i$ se určí tak, že se pomocí zpětné rekurence počítají vektory*

$$\begin{aligned} u_i &= -g_i \\ u_l &= u_{l+1} - \sigma_l y_l, \quad \sigma_l = d_l^T u_{l+1}/b_l, \quad 1 \le l \le i-1 \end{aligned}$$

Pak se pomocí přímé rekurence počítají vektory

$$\begin{aligned} v_1 &= \gamma_1 u_1 \\ v_{k+1} &= v_k + (\rho_k \sigma_k - y_k^T v_k / b_k) d_k, \quad 1 \le k \le i-1 \end{aligned}$$

Nakonec se položí $s_i = v_i$.

Poznámka 68 Platí

$$\begin{aligned} u_{l+1} &= -\left(\prod_{j=l+1}^{i-1} V_j \right) g_i \\ v_{k+1} &= \gamma_1 \left(\prod_{j=1}^{k} V_j \right)^T u_1 + \sum_{l=1}^{k} \frac{\rho_l}{b_l} \left(\prod_{j=l+1}^{k} V_j \right)^T d_l d_l^T u_{l+1} \end{aligned}$$

Metody s proměnnou metrikou s omezenou pamětí (maticový tvar)

Označení:

$$\begin{aligned} D_k &= \begin{bmatrix} d_1, & d_2, & \dots, & d_k \end{bmatrix} \\ Y_k &= \begin{bmatrix} y_1, & y_2, & \dots, & y_k \end{bmatrix} \\ L_k &= \begin{bmatrix} d_1^T y_1, & 0, & \dots, & 0 \\ d_2^T y_1, & d_2^T y_2, & \dots, & 0 \\ \dots, & \dots, & \dots, & \dots \\ d_k^T y_1, & d_k^T y_2, & \dots, & d_k^T y_k \end{bmatrix} \\ C_k &= \operatorname{diag}(d_1^T y_1, \dots, d_k^T y_k) \end{aligned}$$

Věta 87 *Pro m-krokovou metodu DFP platí*

$$B_{k+1} = B_1 - \begin{bmatrix} Y_k, & B_1 D_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0, & L_k^T \\ L_k, & C_k - D_k^T B_1 D_k \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Y_k^T \\ D_k^T B_1 \end{bmatrix}$$

Pro m-krokovou metodu BFGS platí

$$B_{k+1} = B_1 - \begin{bmatrix} Y_k, & B_1 D_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -C_k, & L_k^T - C_k^T \\ L_k - C_k, & D_k^T B_1 D_k \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Y_k^T \\ D_k^T B_1 \end{bmatrix}$$

Pro m-krokovou metodu hodnosti 1 platí

$$B_{k+1} = B_1 + (Y_k - B_1 D_k)(L_k + L_k^T - C_k - D_k^T B_1 D_k)^{-1} (Y_k - B_1 D_k)^T$$

(Předpokládáme, že $1 \le k \le m$).

Poznámka 69 Podobné vzorce platí i pro matici H_{k+1}. V tomto případě je však použití Strangovy formule efektivnější.

Poznámka 70 Matice určené podle Věty 87 lze použít pro výpočet lokálně omezeného kroku nebo v KKT systémech.

Poznámka 71 Obvykle se pokládá $B_1 = (1/\gamma_k)I$. Lze též použít libovolnou řídkou matici B_1.

Metody pro řešení soustav nelineárních rovnic

Nechť $f : R^n \to R^n$ je spojitě diferencovatelné zobrazení. Budeme hledat bod $x^* \in R^n$ takový, že $f(x^*) = 0$.

Poznámka 72 Řešení soustav nelineárních rovnic má blízký vztah k minimalizaci funkcí.

- Minimum funkce $F : R^n \to R$ můžeme hledat řešením soustavy rovnic $g(x) = 0$. Může to však vést k nalezení sedlového bodu nebo maxima.

- Řešení soustavy rovnic $f(x) = 0$ můžeme hledat jako minimum součtu čtverců $F(x) = \frac{1}{2}f^T(x)f(x)$. Může to však vést k nalezení lokálního minima, kdy $F(x) \neq 0$.

Věta 88 *Nechť $f \in C^1 : R^n \to R^n$ a nechť bod $x^* \in R^n$ je lokálním minimem funkce $F(x) = \frac{1}{2}f^T(x)f(x)$, přičemž Jacobiova matice $J(x^*)$ zobrazení f v bodě x^* je regulární. Pak platí $f(x^*) = 0$.*

Definice 47 *Zobrazení $f : R^n \to R^n$ má stejnoměrně omezené derivace, existuje-li $\overline{J} > 0$ tak, že*

$$\|J(x)\| \leq \overline{J} \quad \forall x \in R^n \tag{J3}$$

Definice 48 *Zobrazení $f : R^n \to R^n$ je stejnoměrně regulární, existuje-li $\underline{J} > 0$ tak, že*

$$\|J^{-1}(x)\| \leq \frac{1}{\underline{J}} \quad \forall x \in R^n \tag{J4}$$

Definice 49 *Zobrazení $f : R^n \to R^n$ má lipschitzovské derivace, existuje-li $\overline{L} > 0$ tak, že*

$$\|J(x+d) - J(x)\| \leq \overline{L}\|d\| \quad \forall x, d \in R^n \tag{J5}$$

Definice 50 *Základní metodou pro řešení nelineárních rovnic nazýváme iterační proces, jehož výsledkem je posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ taková, že*

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i s_i$$

kde směrový vektor $s_i \in R^n$ se určuje na základě hodnot x_j, f_j, J_j, $1 \leq j \leq i$, a délka kroku $\alpha_i > 0$ se určuje na základě chování zobrazení $f : R^n \to R^n$ v okolí bodu $x_i \in R^n$.

Definice 51 *Řekneme, že základní metoda pro řešení nelineárních rovnic je globálně konvergentní, jestliže pro libovolný počáteční bod $x_1 \in R^n$ platí*

$$\liminf_{i \to \infty} \|f(x_i)\| = 0$$

Poznámka 73 Newtonova metoda používá směrové vektory $s_i = -J^{-1}(x_i)f(x_i)\ \forall i \in N$. Platí-li (J4), je tento směrový vektor shodný se směrovým vektorem Gaussovy-Newtonovy metody pro minimalizaci součtu čtverců $F(x) = \frac{1}{2}f^T(x)f(x)$, neboť v tomto případě platí

$$(J^T(x_i)J(x_i))^{-1}g(x_i) = (J^T(x_i)J(x_i))^{-1}J^T(x_i)f(x_i) = J^{-1}(x_i)f(x_i)$$

Poznámka 74 Omezíme se na metody takové, že $s_i = -A_i^{-1}f_i$, kde matice A_i, $i \in N$, splňují podmínky

$$\|A_i s\| \le \overline{A}s \qquad \forall s \in R^n, \tag{A3}$$

$$\|A_i s\| \ge \underline{A}s \qquad \forall s \in R^n, \tag{A4}$$

$$\|A_i - J_i\| \le \overline{\vartheta}. \tag{A5}$$

kde $0 < \underline{A} \le \overline{A}$ a $\overline{\vartheta} \ge 0$, a budeme používat označení $h_i = A_i^T f_i$. Pokud $\overline{\vartheta} < \underline{J}$, pak z (J3), (J4) a (A5) plyne (A3), (A4) s $\overline{A} = \overline{J} + \overline{\vartheta}$, $\underline{A} = \underline{J} - \overline{\vartheta}$.

Definice 52 *Základní metoda pro řešení nelineárních rovnic (Definice 50) je metodou spádových směrů, jestliže se směrové vektory $s_i \in R^n$, $i \in N$, určují tak, že*

$$\|A_i s_i + f_i\| \le \overline{\omega}\| f_i\| \tag{$\overline{\mathrm{S1}}$}$$

kde $0 \le \overline{\omega} < 1$, a délky kroku $\alpha_i > 0$, $i \in N$, se určují tak, že $\alpha_i > 0$ je první člen vyhovující podmínce

$$F_{i+1} - F_i \le -\underline{\rho}\,\alpha_i\,F_i \tag{$\overline{\mathrm{S2}}$}$$

v posloupnosti α_i^j, $j \in N$, takové, že $\alpha_i^1 = 1$ a $\underline{\beta}\alpha_i^j \le \alpha_i^{j+1} \le \overline{\beta}\alpha_i^j$, kde $0 < \underline{\beta} \le \overline{\beta} < 1$, $0 < \underline{\rho} \le 1/2$.

Věta 89 *(Konzistence) Nechť zobrazení $f : R^n \to R^n$ splňuje podmínky (J3)-(J5). Nechť matice A_i, $i \in N$, splňují podmínku (A5) s $\overline{\vartheta} < (1-\overline{\omega})\underline{J}/2$. Pak lze v každém iteračním kroku nalézt směrový vektor $s_i \in R^n$ vyhovující podmínce ($\overline{\mathrm{S1}}$) a délku kroku $\alpha_i > 0$ vyhovující podmínce ($\overline{\mathrm{S2}}$). Navíc existuje konstanta $0 < \underline{\alpha} < 1$ taková, že $\alpha_i \ge \underline{\alpha}\ \forall i \in N$.*

Poznámka 75 Podmínky (A3)–(A5) mají pouze teoretický význam (neznáme-li J_i, nemůžeme (A5) ověřit). Dávají však podklad pro použití restartů. Nelze-li splnit podmínky ($\overline{\mathrm{S1}}$) a ($\overline{\mathrm{S2}}$), pokládáme $A_i = J_i$. Pak lze položit $\overline{A} = \overline{J}$, $\underline{A} = \underline{J}$, $\overline{\vartheta} = 0$ a najít $s_i \in R^n$ a $\alpha_i > 0$ vyhovující podmínkám ($\overline{\mathrm{S1}}$) a ($\overline{\mathrm{S2}}$).

Věta 90 *(Globální konvergence) Nechť jsou splněny předpoklady Věty 89. Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost generovaná metodou spádových směrů (takže platí ($\overline{\mathrm{S1}}$) a ($\overline{\mathrm{S2}}$)). Pak $x_i \to x^*$ a $f(x^*) = 0$.*

Věta 91 *(Superlineární konvergence) Nechť $\{x_i\} \subset R^n$ je posloupnost bodů generovaná metodou spádových směrů taková, že $x_i \to x^*$, kde $x^* \in R^n$ je nulovým bodem zobrazení $f \in C^1 : R^n \to R^n$, které vyhovuje podmínkám (J3) a (J4). Nechť*

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\|A_i s_i + f_i\|}{\|f_i\|} = 0$$

$$\lim_{i\to\infty} \frac{\|(A_i - J_i)s_i\|}{\|s_i\|} = 0$$

a nechť $\alpha_i = 1$, kdykoliv tato hodnota vyhovuje podmínce ($\overline{\mathrm{S2}}$). Pak existuje index $k \in N$ takový, že $\alpha_i = 1\ \forall i \ge k$ a $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.

Poznámka 76 Pro řešení nelineárních rovnic existují též metody s lokálně omezeným krokem. Jelikož Newtonovu metodu lze bez problémů realizovat jako metodu spádových směrů, nebudeme se jimi zabývat.

Poznámka 77 Newtonova metoda používá matice $A_i = J_i$, $i \in N$, takže platí (A3)–(A5) s $\overline{A} = \overline{J}$, $\underline{A} = \underline{J}$ a $\overline{\vartheta} = 0$. Splňuje-li zobrazení $f : R^n \to R^n$ podmínky (J3)-(J4), je Newtonova metoda globálně konvergentní. Jestliže $\|J_i s_i + f_i\|/\|f_i\| \to 0$, je tato metoda Q-superlineárně konvergentní.

Diferenční verze Newtonovy metody

Matice A_i, $i \in N$, se volí tak, že

$$A_i e_j = \frac{f(x_i + \delta e_j) - f(x_i)}{\delta}, \quad 1 \le j \le n$$

kde e_j, $1 \le j \le n$, jsou sloupce jednotkové matice řádu n.

Věta 92 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^n$ splňuje podmínky (J3)-(J5) a nechť*

$$\delta \le \frac{(1-\overline{\omega})\underline{J}}{\overline{L}\sqrt{n}}$$

Pak matice A_i, $i \in N$, získané diferenční verzí Newtonovy metody vyhovují podmínkám (A3)–(A5) s $\overline{\vartheta} < (1-\overline{\omega})\underline{J}/2$, $\underline{A} > \underline{J} - (1-\overline{\omega})\underline{J}/2$ a $\overline{A} < \overline{J} + (1-\overline{\omega})\underline{J}/2$.

Poznámka 78 Obvykle se pokládá $\delta = \sqrt{\varepsilon_M}$, kde ε_M je strojová přesnost ($\approx 10^{-16}$ v dvojnásobné aritmetice). Problémy mohou nastat, jsou-li $\underline{J}$ malé a $\overline{J}$, $\overline{L}$ velká.

Kvazinewtonovské metody

Definice 53 *Řekneme, že základní metoda pro řešení nelineárních rovnic je kvazinewtonovskou metodou (QN), jestliže*

$$A_i s_i + f_i = 0$$

kde A_i, $i \in N$, jsou regulární matice konstruované tak, že

$$A_{i+1} = A_i + u_i v_i^T$$

kde $u_i \in R^n$, $v_i \in R^n$ se vybírají tak, aby byla splněna kvazinewtonovská podmínka

$$A_{i+1} d_i = y_i$$

kde $d_i = x_{i+1} - x_i$ a $y_i = f_{i+1} - f_i$.

Věta 93 *Nechť $A_+ = A + uv^T$. Pak $A_+ d = y$ právě tehdy, jestliže $v^T d \neq 0$ a $u = (y - Ad)/v^T d$, takže*

$$A_+ = A + \frac{(y - Ad)v^T}{v^T d} \tag{$\overline{\text{A}}$}$$

Poznámka 79 Nejznámější QN metody:

- Broydenova dobrá metoda: $v = d$

$$A_+ = A + \frac{(y - Ad)d^T}{d^T d}$$

- Broydenova špatná metoda: $v = A^T y$

$$A_+ = A + \frac{(y - Ad)y^T A}{y^T A d}$$

- Metoda aktualizace sloupců: $v = e_k$

$$A_+ = A + \frac{(y - Ad)e_k^T}{e_k^T d}$$

Vektor $e_k \in R^n$ se vybírá tak, že

$$e_k^T d = \max_{1 \le i \le n} e_i^T d$$

($e_i, 1 \le i \le n$, jsou sloupce jednotkové matice).

Věta 94 *Nechť matice A je regulární a platí $(\overline{\mathrm{A}})$. Pak matice A_+ je regulární právě tehdy, jestliže $v^T A^{-1} y \neq 0$.*

Věta 95 *(Inverzní QN metody) Nechť jsou splněny předpoklady věty 94 a nechť $S = A^{-1}$ a $S_+ = A_+^{-1}$ (A_+ je matice určená podle $(\overline{\mathrm{A}})$). Pak platí*

$$S_+ = S + \frac{(d - Sy)v^T S}{v^T S y} \tag{$\overline{\mathrm{S}}$}$$

Poznámka 80 Inverzní QN metody:

- Broydenova dobrá metoda: $v = d$

$$S_+ = S + \frac{(d - Sy)d^T S}{d^T S y}$$

- Broydenova špatná metoda: $S^T v = y$

$$S_+ = S + \frac{(d - Sy)y^T}{y^T y}$$

- Inverzní metoda aktualizace sloupců: $S^T v = e_k$

$$S_+ = S + \frac{(d - Sy)e_k^T}{e_k^T y}$$

Vektor $e_k \in R^n$ se vybírá tak, že

$$e_k^T y = \max_{1 \le i \le n} e_i^T y$$

Věta 96 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^n$ vyhovuje podmínkám (J3)-(J5) a nechť $x^* \in R^n$ je bod takový, že $f(x^*) = 0$. Pak existují čísla $\overline{\delta} > 0$, $\overline{\vartheta} > 0$ taková, že pokud $\|x_1 - x^*\| \le \overline{\delta}$ a $\|A_1 - J_1\| \le \overline{\vartheta}$ a posloupnost $\{x_i\} \subset R^n$ je určená dobrou Broydenovou metodou s jednotkovým výběrem délky kroku ($\alpha_i = 1\ \forall i \in N$), pak $x_i \to x^*$ Q-superlineárně.*

Odhad parametrů systémů diferenciálních rovnic

Máme minimalizovat funkci

$$F(x) = \int_{t_0}^{t_1} F_A(x, y(x,t), t)\,\mathrm{d}t + F_T(x, y(x,t_1)),$$

kde

$$\frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}t} = f_S(x, y(x,t), t), \quad y(x,t_0) = f_I(x)$$

(stavový systém). Přitom $x \in R^n$, a stavový systém obsahuje n_S diferenciálních rovnic.

Odstranění integrálu:

$$F(x) = \tilde{F}_A(x, t_1) + F_T(x, y(x,t_1)),$$

kde

$$\frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}t} = f_S(x, y(x,t), t), \quad y(x,t_0) = f_I(x)$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{F}_A(x,t)}{\mathrm{d}t} = F_A(x, y(x,t), t), \quad \tilde{F}_A(x,t_0) = 0$$

Řešíme $n_S + 1$ diferenciálních rovnic v přímém směru.

Předpoklady:

(A1) Existuje spojité řešení stavového systému na intervalu $[t_0, t_1]$ kdykoliv $x \in X$.

(A2) Funkce F_A, F_T, f_S, f_I jsou dvakrát spojitě diferencovatelné na X.

Přitom $X \subset R^n$ je oblast obsahující všechny body $x_i \in R^n$ $i \in N$, získané během iteračního procesu.

Přímý výpočet gradientu

Označíme

$$u(x,t) = \frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}x}.$$

Derivováním dostaneme

$$g^T(x) = \tilde{g}_A^T(x, t_1) + \frac{\partial F_T(x, y(x,t_1))}{\partial x} + \frac{\partial F_T(x, y(x,t_1))}{\partial y} u(x, t_1),$$

kde

$$\frac{\mathrm{d}u(x,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial x} + \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial y} u(x,t), \quad u(x,t_0) = \frac{\mathrm{d}f_I(x)}{\mathrm{d}x},$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{g}_A^T(x,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial x} + \frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial y} u(x,t), \quad \tilde{g}_A^T(x,t_0) = 0.$$

Řešíme navíc $n(n_S + 1)$ diferenciálních rovnic v přímém směru.

Zpětný výpočet gradientu

Nechť $p(t)$ je libovolné zobrazení a $y(x,t)$ je řešení stavového systému, takže

$$f_S(x,y,t) - \frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}t} = 0$$

Můžeme tedy psát

$$F(x) = \int_{t_0}^{t_1} \left[F_A(x,y,t) + p^T(t) \left(f_S(x,y,t) - \frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}t} \right) \right] \mathrm{d}t + F_T(x, y(x,t_1))$$

Integrování per partes $u^T v' = (u^T v)' - (u^T)' v$, kde $u = p(t)$, $v = y(x,t)$

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_{t_0}^{t_1} \left[F_A(x,y,t) + p^T(t) f_S(x,y,t) + \frac{\mathrm{d}p^T(t)}{\mathrm{d}t} y(x,t) \right] \mathrm{d}t \\ &+ p^T(t_0) y(x,t_0) - p^T(t_1) y(x,t_1) + F_T(x, y(x,t_1)). \end{aligned}$$

Derivováním dostaneme

$$\begin{aligned} g^T(x) &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial x} + p^T(t) \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial x} \right. \\ &+ \left. \left(\frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial y} + p^T(t) \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial y} + \frac{\mathrm{d}p^T(t)}{\mathrm{d}t} \right) \frac{\mathrm{d}y(x,t)}{\mathrm{d}x} \right] \mathrm{d}t \\ &+ p^T(t_0) \frac{\mathrm{d}f_I(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial x} + \left(\frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial y} - p^T(t_1) \right) \frac{\mathrm{d}y(x,t_1)}{\mathrm{d}x}. \end{aligned}$$

Funkci $p(t) = p(x,t)$ volíme tak, aby se kulaté závorky vynulovaly. Tedy

$$-\frac{\mathrm{d}p^T(x,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial y} + p^T(x,t) \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial y}, \quad p^T(x,t_1) = \frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial y},$$

$$g^T(x) = \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial x} + p^T(x,t) \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial x} \right] \mathrm{d}t + p^T(x,t_0) \frac{\mathrm{d}f_I(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial x}.$$

Odstranění integrálu

$$g(x) = \tilde{g}_A(x,t_0) + \left(\frac{\mathrm{d}f_I(x)}{\mathrm{d}x} \right)^T p(x,t_0) + \left(\frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial x} \right)^T,$$

kde

$$-\frac{\mathrm{d}p(x,t)}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial y} \right)^T + \left(\frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial y} \right)^T p(x,t), \quad p(x,t_1) = \left(\frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial y} \right)^T,$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{g}_A(x,t)}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial x} \right)^T + \left(\frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial x} \right)^T p(x,t), \quad \tilde{g}_A(x,t_1) = 0.$$

Řešíme navíc $n_S + n$ diferenciálních rovnic ve zpětném směru.

Přímý výpočet Hessovy matice

Označíme

$$v(x,t) = \frac{\mathrm{d}u(x,t)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}^2 y(x,t)}{\mathrm{d}x^2}.$$

Derivováním dostaneme

$$\begin{aligned}
G(x) &= \tilde{G}_A(x,t_1) + \frac{\partial^2 F_T(x,y(x,t_1))}{\partial x^2} \\
&+ \left[2\,\frac{\partial^2 F_T(x,y(x,t_1))}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 F_T(x,y(x,t_1))}{\partial y^2} u(x,t_1)\right] u(x,t_1) \\
&+ \frac{\partial F_T(x,y(x,t_1))}{\partial y} v(x,t_1),
\end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}v(x,t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial^2 f_S(x,y,t)}{\partial x^2} + \left[2\,\frac{\partial^2 f_S(x,y,t)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 f_S(x,y,t)}{\partial y^2} u(x,t)\right] u(x,t) \\
&+ \frac{\partial f_S(x,y,t)}{\partial y} v(x,t), \quad v(x,t_0) = \frac{\mathrm{d}^2 f_I(x)}{\mathrm{d}x^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\tilde{G}_A(x,t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial^2 F_A(x,y,t)}{\partial x^2} + \left[2\,\frac{\partial^2 F_A(x,y,t)}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 F_A(x,y,t)}{\partial y^2} u(x,t)\right] u(x,t) \\
&+ \frac{\partial F_A(x,y,t)}{\partial y} v(x,t), \quad \tilde{G}_A(x,t_0) = 0
\end{aligned}$$

Řešíme navíc $n^2(n_S+1)$ diferenciálních rovnic v přímém směru.

Automatické derivování

Existují dva postupy

- Přímé automatické derivování – výpočet derivace zobrazení
- Zpětné automatické derivování – výpočet gradientu funkce

Ukážeme na príkladech použití obou postupů

Příklad 8 (přímé derivování). Máme nalézt derivaci funkce $F(x) = x_1 \sin(x_2 x_3 + x_4)$ podle proměnné x_3.

$$
\begin{array}{lllll}
x_1 & = & x_1 & & F = x_1 \sin(x_2 x_3 + x_4) \\
x_1' & = & 0 & & \\
x_2 & = & x_2 & & \\
x_2' & = & 0 & & \\
x_3 & = & x_3 & & \\
x_3' & = & 1 & & \\
x_4 & = & x_4 & & \\
x_4' & = & 0 & & \\
\hline
x_5 & = & x_2 x_3 & = & x_2 x_3 \\
x_5' & = & x_2 x_3' + x_2' x_3 & = & x_2 \\
x_6 & = & x_4 + x_5 & = & x_4 + x_2 x_3 \\
x_6' & = & x_4' + x_5' & = & x_2 \\
x_7 & = & \sin(x_6) & = & \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
x_7' & = & \cos(x_6) x_6' & = & \cos(x_4 + x_2 x_3) x_2 \\
x_8 & = & x_1 x_7 & = & x_1 \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
x_8' & = & x_1 x_7' + x_1' x_7 & = & x_1 x_2 \sin(x_4 + x_2 x_3) x_2 \\
\hline
F & = & x_8 & = & x_1 \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
F' & = & x_8' & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) x_2
\end{array}
$$

Příklad 9 (zpětné derivování). Máme nalézt gradient funkce $F(x) = x_1 \sin(x_2 x_3 + x_4)$.

$$
\begin{array}{lllll}
x_1 & = & x_1 & & \overline{x}_i = \partial F / \partial x_i \\
x_2 & = & x_2 & & \\
x_3 & = & x_3 & & \\
x_4 & = & x_4 & & \\
\hline
x_5 & = & x_2 x_3 & = & x_2 x_3 \\
x_6 & = & x_4 + x_5 & = & x_4 + x_2 x_3 \\
x_7 & = & \sin(x_6) & = & \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
x_8 & = & x_1 x_7 & = & x_1 \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
\hline
\overline{x}_8 & = & 1 & & \\
\overline{x}_7 & = & \overline{x}_8 x_1 & = & x_1 \\
\overline{x}_1 & = & \overline{x}_8 x_7 & = & \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
\overline{x}_6 & = & \overline{x}_7 \cos x_6 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) \\
\overline{x}_5 & = & \overline{x}_6 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) \\
\overline{x}_4 & = & \overline{x}_6 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) \\
\overline{x}_3 & = & \overline{x}_5 x_2 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) x_2 \\
\overline{x}_2 & = & \overline{x}_5 x_3 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) x_3 \\
\hline
\partial F / \partial x_1 & = & \overline{x}_1 & = & \sin(x_4 + x_2 x_3) \\
\partial F / \partial x_2 & = & \overline{x}_2 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) x_3 \\
\partial F / \partial x_3 & = & \overline{x}_3 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3) x_2 \\
\partial F / \partial x_4 & = & \overline{x}_4 & = & x_1 \cos(x_4 + x_2 x_3)
\end{array}
$$

Minimalizace s nelineárními omezeními (nelineární programování)

Definice 54 *Úlohou nelineárního programování nazýváme nalezení bodu $x^* \in R^n$ takového, že*

$$x^* = \arg \min_{\substack{c_I(x) \leq 0 \\ c_E(x) = 0}} F(x) \tag{NP}$$

kde $F : R^n \to R$, $c_I : R^n \to R^{m_I}$, $c_E : R^n \to R^{m_E}$ jsou dvakrát spojitě diferencovatelná zobrazení ($c_I(x) \leq 0$ je míněno po složkách).

Poznámka 81 Předpokládáme, že $I = \{1, \ldots, m_I\}$, $E = \{m_I + 1, \ldots, m_I + m_E = m\}$ a že minimum v (NP) je lokální.

Poznámka 82 Množina

$$C = \{x \in R^n : c_I(x) \leq 0,\, c_E(x) = 0\}$$

se nazývá přípustnou množinou úlohy (NP).

Definice 55 *Nechť $C \subset R^n$ je přípustná množina úlohy (NP) a $x \in C$. Pak množinu*

$$\overline{E}(x) = E \cup \{i \in I : c_i(x) = 0\}$$

nazveme množinou indexů omezení aktivních v bodě x.

Definice 56 *Nechť $C \subset R^n$ je přípustná množina úlohy (NP) a $x \in C$. Jestliže gradienty $\nabla c_i(x)$, $i \in \overline{E}(x)$, jsou lineárně nezávislé, řekneme, že jsou splněny podmínky LICQ (linear independence constraint qualification).*

Poznámka 83 Podmínky LICQ v podstatě zajišťují, aby linearizovaná omezení dostatečně dobře vystihovala nelineární omezení. Často se používají slabší podmínky MFCQ (Mangasarian-Fromowitz constraint qualification):

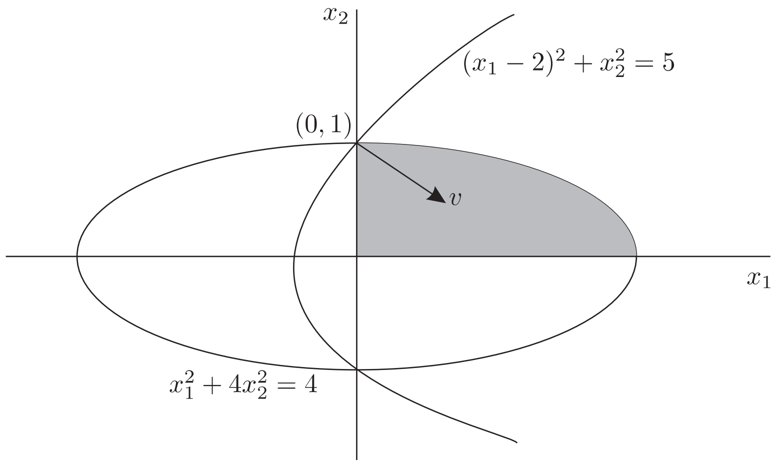
(a) Gradienty $\nabla c_i(x)$, $i \in E$, jsou lineárně nezávislé.

(b) Existuje vektor $v \in R^n$ takový, že $v^T \nabla c_i(x) = 0\ \forall i \in E$ a $v^T \nabla c_i(x) < 0\ \forall i \in \overline{E}(x) \backslash E$.

Z LICQ plyne MFCQ (ale ne naopak). Pro praktické použití jsou výhodnější podmínky LICQ.

Příklad 10 Platí MFCQ, neplatí LICQ:

$$\begin{aligned} c_1(x) &= -x_1 \leq 0 \\ c_2(x) &= -x_2 \leq 0 \\ c_3(x) &= x_1^2 + 4x_2^2 - 4 \leq 0 \\ c_4(x) &= (x_1 - 2)^2 + x_2^2 - 5 \leq 0 \end{aligned}$$



$$x^* = [0,1]^T \in R^2$$
$$\overline{E}(x^*) = \{1,3,4)$$

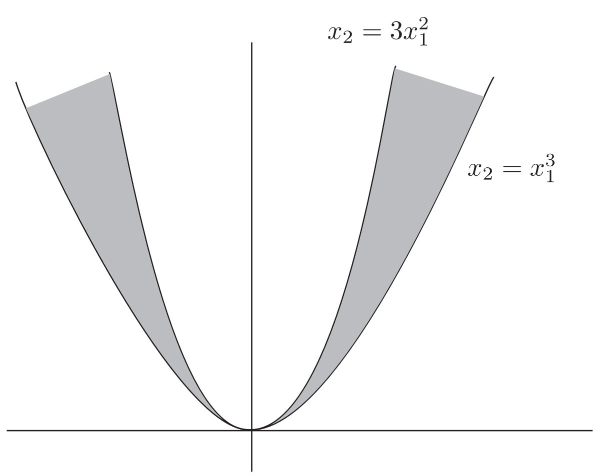
$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_3(x^*) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 8x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 8 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_4(x^*) = \begin{bmatrix} 2(x_1-2) \\ 2x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Tyto vektory nejsou lineárně nezávislé, neboť je jich víc než $n = 2$. Pro $v = [1, -1]^T$ platí

$$v^T \nabla c_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} = -1 < 0$$
$$v^T \nabla c_3 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 8 \end{bmatrix} = -8 < 0$$
$$v^T \nabla c_4 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 \\ 2 \end{bmatrix} = -6 < 0$$

Příklad 11 Neplatí MFCQ

$$\begin{aligned} c_1(x) &= x_1^2 - x_2 \le 0 \\ c_2(x) &= -3x_1^2 + x_2 \le 0 \end{aligned}$$



$$x^* = [0,0]^T$$

$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} -6x_1 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Pro libovolný vektor $v \in R^n$ platí

$$\begin{aligned} v^T \nabla c_1(x^*) &= -v_2 \\ v^T \nabla c_2(x^*) &= +v_2 \end{aligned}$$

Nemůže současně platit $v_2 > 0$ a $v_2 < 0$.

Definice 57 *Nechť $C \subset R^n$ je přípustná množina úlohy (NP) a $x \in C$. Jestliže existují vektory $u_I \in R^{m_I}$ a $u_E \in R^{m_E}$ takové, že*

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x,u) &= 0 \\ c_i(x) &\leq 0, \quad u_i \geq 0, \quad u_i c_i(x) = 0, \quad i \in I \\ c_i(x) &= 0, \quad i \in E \end{aligned}$$

kde

$$L(x,u) = f(x) + u_I^T c_I(x) + u_E^T c_E(x)$$

řekneme, že $x \in C$ je KKT (Karush, Kuhn, Tucker) bodem úlohy (NP).

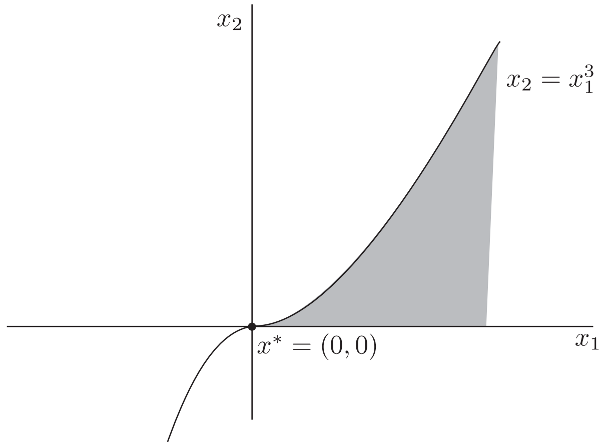
Poznámka 84 Funkce $L(x,u)$ se nazývá Lagrangeovou funkcí úlohy (NP). Vektory $u_I \in R^{m_I}$ a $u_E \in R^{m_E}$ se nazývají Lagrangeovými multiplikátory. Dvojice $(x,u) \in R^{n+m}$ se nazývá KKT párem úlohy (NP).

Věta 97 *(Nutné podmínky 1.řádu) Nechť bod $x \in C$ je řešením úlohy (NP) a jsou v něm splněny podmínky LICQ (nebo MFCQ). Pak $x \in C$ je KKT bodem úlohy (NP).*

Poznámka 85 Jsou-li funkce $c_i(x)$, $i \in I$, konvexní a funkce $c_i(x)$, $i \in E$, lineární, můžeme podmínky LICQ (nebo MFCQ) vynechat.

Příklad 12 Uvažujeme úlohu NP, kde

$$\begin{aligned} &F(x_1,x_2) = x_1 \\ &c_1(x_1,x_2) = -x_1^3 + x_2 \leq 0 \\ &c_2(x_1,x_2) = -x_2 \leq 0 \end{aligned}$$



Minimum $x^* = [0,0]^T$

$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} -3x_1^2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

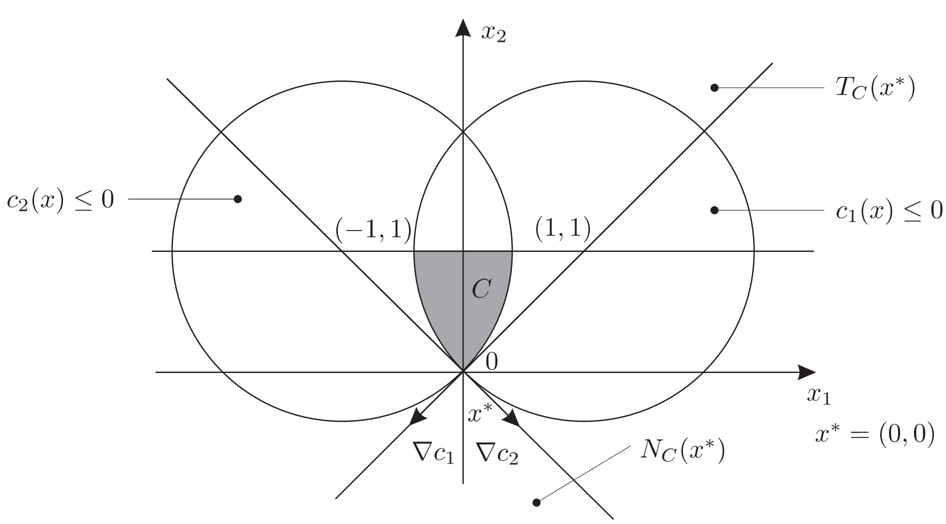
Stejně jako v příkladu 11 neplatí MFCQ.

$$\begin{aligned} L(x,u) &= x_1 + u_1(-x_1^3 + x_2) + u_2(-x_2) \\ \nabla L(x^*,u) &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + u_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} + u_2 \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} \neq 0 \end{aligned}$$

(pro libovolný vektor $u \in R^2$).

Příklad 13 Uvažujeme úlohu NP, kde

$$\begin{aligned} F(x) &= x_2 \\ c_1(x) &= \frac{1}{2}(x_1-1)^2 + \frac{1}{2}(x_2-1)^2 - 1 \leq 0 \\ c_2(x) &= \frac{1}{2}(x_1+1)^2 + \frac{1}{2}(x_2-1)^2 - 1 \leq 0 \\ c_3(x) &= x_2 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$



$$\nabla c_1(x^*) = \begin{bmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \nabla c_2(x^*) = \begin{bmatrix} x_1 + 1 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Linearizovaná omezení

$$\left.\begin{array}{r} -x_1 - x_2 \leq 0 \\ x_1 - x_2 \leq 0 \end{array}\right\} \equiv T_C(x^*)$$

Musí být

$$\begin{array}{rl} g^T v \geq 0 & \forall v \in T_C(x^*) \\ -g^T v \leq 0 & \forall v \in T_C(x^*) \end{array}$$

$$\Updownarrow$$

$$-g \in N_C(x^*)$$

$$\begin{aligned} N_C(x) &= \operatorname{cone}(\operatorname{conv}\{\nabla c_1(x^*), \nabla c_2(x^*)\}) \\ &= \{u_1 \nabla c_1(x^*) + u_2 \nabla c_2(x^*) : u_1 \geq 0,\ u_2 \geq 0\} \end{aligned}$$

Tedy

$$-g = u_1^* \nabla c_1(x^*) + u_2^* \nabla c_2(x^*) \quad \Rightarrow \quad g + u_1^* \nabla c_1(x^*) + u_2^* \nabla c_2(x^*) = 0$$

$$\begin{aligned} L(x, u) &= x_2 + u_1 c_1(x) + u_2 c_2(x) + u_3 c_3(x) \\ \nabla L(x, u) &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} + u_1 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} + u_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + u_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \\ & u_1 = \frac{1}{2},\ u_2 = \frac{1}{2},\ u_3 = 0, \\ & c_1 = 0,\ c_2 = 0,\ c_3 = -1 \end{aligned}$$

Definice 58 *Nechť $x \in C$ je KKT bodem úlohy (NP). Jestliže platí*

$$c_i(x) < u_i \quad \forall i \in I$$

řekneme, že v bodě $x \in C$ jsou splněny podmínky striktní komplementarity (SC).

Příklad 14 *Uvažujme úlohu (NP), kde*

$$\begin{aligned} F(x_1, x_2) &= \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ c_1(x_1, x_2) &= -x_1 \leq 0 \\ c_2(x_1, x_2) &= -x_2 \leq 0 \end{aligned}$$

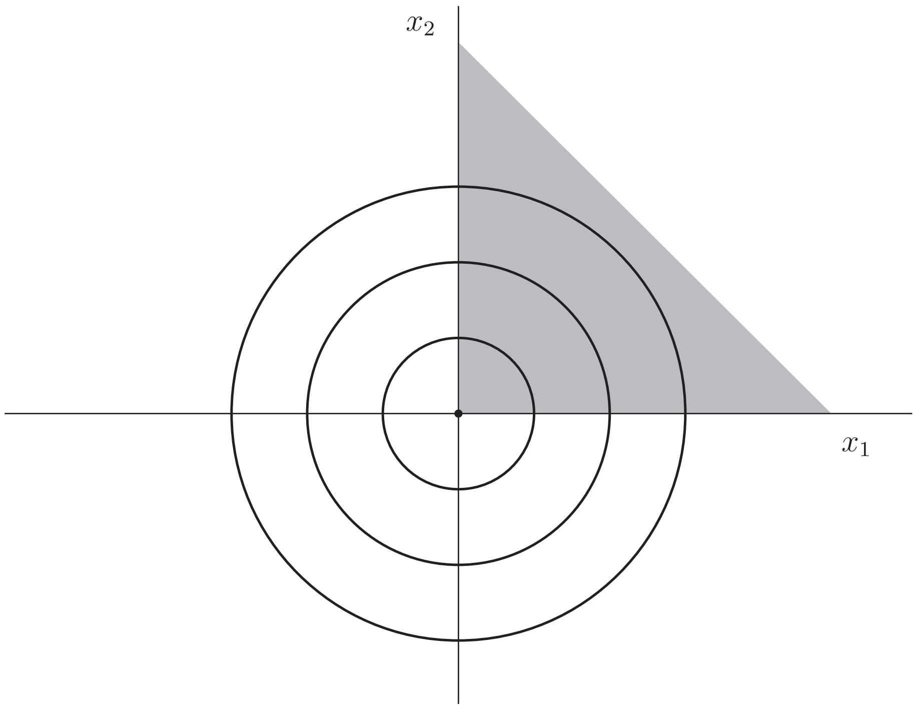
Platí

$$\begin{aligned} L(x, u) &= \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) - u_1 x_1 - u_2 x_2 \\ \nabla_x L(x, u) &= \begin{bmatrix} x_1 - u_1 \\ x_2 - u_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Je-li bod x KKT bodem úlohy (NP), musí platit $\nabla_x L(x,u) = 0$, $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$, $u_1 \geq 0$, $u_2 \geq 0$, $u_1 x_1 = 0$, $u_2 x_2 = 0$, což lze zajistit jedině tehdy, jestliže

$$\begin{aligned} x_1 &= u_1 = 0 \\ x_2 &= u_2 = 0 \end{aligned}$$

takže nejsou splněny podmínky SC.



Funkce $F(x_1, x_2)$ má minimum (bez omezení) v bodě $x = [0,0]^T$. Je tedy možné omezení $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$ vypustit.

Poznámka 86 Nejsou-li splněny podmínky SC, zkomplikují se podmínky 2.řádu pro řešení úlohy (NP). Také nastanou problémy při vyšetřování výpočetních algoritmů. Proto budeme splnění podmínek SC předpokládat.

Věta 98 *(Postačující podmínky 2.řádu) Nechť bod $x \in C$ je KKT bodem úlohy (NP) a jsou v něm splněny podmínky LICQ (nebo MFCQ) a SC. Jestliže*

$$z^T \nabla^2_{xx} L(x,u) z > 0$$

pro všechny vektory $z \in R^n$, $z \neq 0$ takové, že

$$z^T \nabla c_i(x) = 0 \quad \forall i \in \overline{E}(x)$$

pak $x \in C$ je řešením úlohy (NP).

Definice 59 *Budeme používat označení*

$$\begin{aligned} a_i(x) &= \nabla c_i(x), \quad i \in I \cup E \\ A_I(x) &= [a_i(x),\ i \in I] \\ A_E(x) &= [a_i(x),\ i \in E] \\ \overline{A}(x) &= [a_i(x),\ i \in \overline{E}(x)] \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
g(x,u) = \nabla_x L(x,u) &= \nabla F(x) + \sum_{i \in I \cup E} u_i \nabla c_i(x) = \nabla F(x) + A_I(x) u_I + A_E(x) u_E \\
G(x,u) = \nabla^2_{xx} L(x,u) &= \nabla^2 F(x) + \sum_{i \in I \cup E} u_i \nabla^2 c_i(x)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
C_I &= \operatorname{diag}\{c_i, i \in I\} \\
U_I &= \operatorname{diag}\{u_i, i \in I\}
\end{aligned}
$$

a označení $\overline{Z}(x)$ pro matici, jejíž sloupce tvoří ortonormální bázi v ortogonálním doplňku podprostoru generovaného vektory $a_i(x)$, $i \in \overline{E}(x)$, takže (jsou-li splněny podmínky LICQ) $[\overline{A}(x), \overline{Z}(x)]$ je regulárně čtvercová matice, $\overline{Z}^T(x)\overline{Z}(x) = I$ a $\overline{Z}^T(x)\overline{A}(x) = 0$.

Poznámka 87 Použijeme-li označení z Definice 59, můžeme postačující podmínky 2.řádu (Věta 98) zapsat ve tvaru

$$
\begin{aligned}
g(x,u) &= 0 \\
c_I(x) &\le 0, \quad u_I \ge 0, \quad U_I C_I(x) = 0 \\
c_E(x) &= 0 \\
\overline{Z}^T(x) G(x,u) \overline{Z}(x) &\succ 0 \quad \text{(positivně definitní)}
\end{aligned}
$$

Minimalizace na lineární varietě

Minimalizace s lineárními omezeními ve tvaru rovností. Máme řešit úlohu

$$
\begin{aligned}
x^* &= \arg\min_{x \in C} F(x) \\
C &= \{x \in R^n : a_i^T x = \alpha_i,\ i \in E\}
\end{aligned}
$$

Poznámka 88 KKT podmínky mají v tomto případě tvar

$$
\begin{aligned}
g(x) + Au &= 0 \\
A^T x &= b
\end{aligned}
$$

kde $g(x)$ je gradient funkce $F(x)$, $A = [a_1, \ldots, a_m]$, $b = [\alpha_1, \ldots, \alpha_m]^T$.

Poznámka 89 Krok modifikované Newtonovy metody pro řešení KKT systému má tvar

$$
\begin{bmatrix} B & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s \\ u \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ 0 \end{bmatrix}
$$

kde B je (obvykle s.p.d.) aproximace Hessovy matice. Pak $x_+ = x + \alpha s$, kde $\alpha > 0$ je délka kroku.

Metody promítaných gradientů

Řešíme-li soustavu z poznámky 89, dostaneme

$$\begin{aligned} u &= -(A^TB^{-1}A)^{-1}A^TB^{-1}g \\ s &= -(B^{-1} - B^{-1}A(A^TB^{-1}A)^{-1}A^TB^{-1})g = -Pg \end{aligned}$$

Poznámka 90 Metody promítaných gradientů reprezentují lineární varietu maticí $C = (A^TB^{-1}A)^{-1}$ (nebo trojúhelníkovým rozkladem $R^TR = A^TB^{-1}A$) a maticí $P = B^{-1} - B^{-1}A(A^TB^{-1}A)^{-1}A^TB^{-1}$

Přidání omezení

Věta 99 *Nechť $A^+ = [A, a]$, kde $a \notin \mathcal{L}(A)$ a nechť $C^+ = ((A^+)^THA^+)^{-1}$, $(R^+)^TR^+ = (A^+)^THA^+$, $P^+ = H - HA^+C^+(A^+)^TH$. Pak platí*

$$\begin{aligned} C^+ &= \begin{bmatrix} C + \frac{CA^THaa^THAC}{a^TPa}, & -\frac{CA^THa}{a^TPa} \\ -\frac{a^THAC}{a^TPa}, & \frac{1}{a^TPa} \end{bmatrix}, \\ R^+ &= \begin{bmatrix} R & r \\ 0 & \rho \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

kde $R^Tr = A^THa$, $\rho^2 = a^THa - r^Tr$, a

$$P^+ = P - \frac{Paa^TP}{a^TPa}$$

Ubrání omezení

Věta 100 *Nechť $AM = [A^-, a]$, kde M je nějaká permutační matice, a nechť $C^- = ((A^-)^THA^-)^{-1}$, $(R^-)^TR^- = (A^-)^THA^-$. Nechť*

$$M^TCM = \begin{bmatrix} \tilde{C} & \tilde{c} \\ \tilde{c}^T & \tilde{\gamma} \end{bmatrix}$$

a nechť Q je ortogonální matice taková, že

$$QRM = \begin{bmatrix} \tilde{R} & \tilde{r} \\ 0 & \tilde{\rho} \end{bmatrix}$$

je horní trojúhelníková matice. Pak platí

$$C^- = \tilde{C} - \frac{\tilde{c}\tilde{c}^T}{\tilde{\gamma}}$$

a $R^- = \tilde{R}$.

Metody redukovaných gradientů

Předpokládáme, že Z je matice jejíž sloupce tvoří ortonormální bázi v ortogonálním doplňku podprostoru generovaném sloupci matice A. Má-li A plnou hodnost, je $[A, Z]$ čtvercová regulární a platí $A^T Z = 0$, $Z^T Z = I$.

Poznámka 91 Označme $\tilde{g} = Z^T g$ redukovaný gradient, $\tilde{G} = Z^T G Z$ a $\tilde{B} = Z^T B Z$ redukovanou Hessovu matici a její aproximaci. Pak

$$\begin{aligned} \tilde{g} &= Z^T g \\ \tilde{s} &= -\tilde{B}^{-1}\tilde{g} = -(Z^T B Z)^{-1} Z^T g \\ s &= Z\tilde{s} = -Z(Z^T B Z)^{-1} Z^T g \end{aligned}$$

Poznámka 92 V metodách s proměnnou metrikou se redukované matice $\tilde{B} = Z^T B Z$ a $\tilde{H} = \tilde{B}^{-1} = Z^T H Z$ aktualizují pomocí redukovaných veličin $\tilde{y} = \tilde{g}_+ - \tilde{g} = Z^T(g_+ - g) = Z^T y$ a $\tilde{d} = \alpha\tilde{s}$.

Poznámka 93 Metody redukovaných gradientů reprezentují lineární varientu trojúhelníkovým rozkladem $R^T R = A^T A$ a maticí Z takovou, že $A^T Z = 0$ a $Z^T Z = I$. Lagrangeovy multiplikátory se počítají podle vzorce $u = -(R^T R)^{-1} A^T g$.

Přidání omezení

Věta 101 *Nechť $A^+ = [A, a]$, kde $a \notin \mathcal{L}(A)$. Nechť $\tilde{a} = Z^T a$ a Q je ortogonální matice taková, že*

$$\tilde{a}^T Q = [0, \dots, 0, \|\tilde{a}\|]$$

Položme $ZQ = [Z^+, z]$. Pak $(A^+)^T Z^+ = 0$ a $(Z^+)^T Z^+ = I$.

Ubrání omezení

Věta 102 *Nechť $AM = [A^-, a]$, kde M je nějaká permutační matice. Nechť Q je ortogonální matice taková, že matice QRM je horní trojúhelníková. Nechť $Z^- = [Z, z]$, kde*

$$z = AM(QRM)^{-1}[0, \dots, 0, 1]^T$$

Pak platí $(A^-)^T Z^- = 0$ a $(Z^-)^T Z^- = I$.

Metody aktualizovaných gradientů

Předpokládejme, že S je matice s lineárně nezávislými sloupci taková, že

$$SS^T = P = H - HA(A^T H A)^{-1} A^T H$$

Poznámka 94 Metody aktualizovaných gradientů určují směrový vektor podle vzorců

$$\begin{aligned} \tilde{s} &= -\tilde{g} = -S^T g \\ s &= S\tilde{s} = -S\tilde{g} = -SS^T g \end{aligned}$$

Matice S se aktualizují pomocí metod s proměnnou metrikou v součinovém tvaru. Aktualizace metody BFGS má tvar

$$S_+ = \sqrt{\gamma}\left(S_+ + \frac{1}{b}S\tilde{d}\left(\sqrt{\frac{\rho}{\gamma}\frac{b}{c}}\tilde{d} - \tilde{y}\right)^T\right)$$

kde $\tilde{y} = \tilde{g}_+ - \tilde{g} = S^T(g_+ - g) = S^T y$ a $\tilde{d} = \alpha\tilde{s}$.

Poznámka 95 Metody aktualizovaných gradientů reprezentují lineární varietu trojúhelníkovým rozkladem $R^T R = A^T A$ a maticí S takovou, že $SS^T = H - HA(A^T HA)^{-1}A^T H$. Lagrangeovy multiplikátory se počítají podle vzorce $u = -(R^T R)^{-1}A^T g$

Přidání omezení

Věta 103 *Nechť $A^+ = [A, a]$, kde $a \notin \mathcal{L}(A)$. Nechť $S = [\tilde{S}, s]$ a*

$$S^+ = \tilde{S} - \left(\frac{1 - \lambda a^T s}{a^T SS^T a}SS^T a + \lambda s\right)a^T\tilde{S}$$

kde λ je kořenem kvadratické rovnice

$$\lambda^2 a^T\tilde{S}\tilde{S}^T a + 2\lambda a^T s = 1$$

Pak $(A^+)^T S^+ = 0$ a platí

$$S^+(S^+)^T = H - HA^+((A^+)^T HA^+)^{-1}(A^+)^T H$$

Ubrání omezení

Věta 104 *Nechť $AM = [A^-, a]$, tak M je nějaká permutační matice. Nechť Q je ortogonální matice taková, že QRM je horní trojúhelníková. Nechť $S^- = [S, s]$, kde*

$$s = AM(QRM)^{-1}[0, \ldots, 0, 1]^T$$

Pak platí $(A^-)^T S^- = 0$ a

$$S^-(S^-)^T = H - HA^-((A^-)^T HA^-)^{-1}(A^-)^T H$$

Minimalizace s lineárními omezeními

Máme řešit úlohu

$$\begin{aligned} x^* &= \arg\min_{x\in C} F(x) \\ C &= \{x \in R^n : a_i^T x \le \alpha_i,\ i \in I,\ a_i^T x = \alpha_i,\ i \in E\} \end{aligned}$$

Tedy

$$c_i(x) = a_i^T x - \alpha_i, \quad i \in I \cup E$$

Metody aktivních omezení

Algoritmus 8 *(metoda aktivních omezení)*

K1: Najdeme přípustný bod $x \in C$ (úloha lineárního programování), určíme množinu $\overline{E}(x)$ indexů omezení aktivních v bodě $x \in C$ určíme reprezentaci variety

$$\overline{L}(x) = \bigcap_{i \in \overline{E}(x)} L(a_i, \alpha_i)$$

vypočteme hodnotu $F(x)$ a gradient $g(x)$.

K2: Určíme směrový vektor $s \in \overline{L}(x)$ (minimalizace na lineární varietě) a vektor Lagrangeových multiplikátorů u. Jestliže $\|s\| = 0$ a $u \geq 0$ ukončíme výpočet (máme KKT bod $\Rightarrow$ řešení)

K3: Jestliže $\|s\| = 0$ a neplatí $u \geq 0$ určíme index $\ell \in \overline{E}(x)$ takový, že

$$u_\ell = \min_{i \in \overline{E}(x)} (u_i) ,$$

ubereme omezení s indexem ℓ, čímž změníme množinu $\overline{E}(x)$, varietu $\overline{L}(x)$ a její reprezentaci a přejdeme na krok K2.

K4: Jestliže $\|s\| \neq 0$ určíme délku kroku $0 < \alpha < \overline{\alpha}$ (například Armijovým výběrem), kde

$$\overline{\alpha} = \min_{i \notin \overline{E}(x), \alpha_i^T s > 0} \frac{\alpha_i - a_i^T x}{a_i^T s}$$

vypočteme hodnotu $F(x)$ a gradient $g(x)$.

K5: Pokud $\alpha = \overline{\alpha}$ přidáme nová aktivní omezení čímž změníme množinu $\overline{E}(x)$, varietu $\overline{L}(x)$ a její reprezentaci.

K6: Přejdeme na krok K2.

Poznámka 96 Minimum na lineární varietě se obvykle určuje přibližně. Omezení se ubírá pokud $\|Pg\| \leq \varepsilon \|g\|$ (metody promítaných gradientů), nebo $\|\tilde{g}\| \leq \varepsilon \|g\|$ (metody redukovaných gradientů), kde $\varepsilon > 0$ je požadovaná přesnost.

Lineární programování

Máme řešit úlohu

$$\begin{aligned} x^* &= \arg\min_{x \in C} g^T x \\ C &= \{x \in R^n : a_i^T x \leq \alpha_i,\ i \in I,\ a_i^T x = \alpha_i,\ i \in E\} \end{aligned}$$

Simpexová metoda

Je to metoda největšího spádu s lineárními omezeními (takže $B = I$). Délka kroku se vždy vybírá tak, aby platilo $\alpha = \overline{\alpha}$.

- Začneme-li v libovolném přípustném bodě, dostaneme se vždy do vrcholu.
- Je-li tento vrchol KKT bodem, ukončíme výpočet.
- V opačném případě ubereme omezení a po hraně se dostaneme do sousedního vrcholu.
- Procházíme vrcholy $\Rightarrow$ konečný počet kroků, ale exponenciální složitost.

Nalezení přípustného bodu

Nechť $x \in R^n$. Pro zjednodušení budeme předpokládat, že $a_i^T x \geq \alpha_i$ pro $i \in E$. Nechť

$$\begin{aligned} I_1(x) &= \{i \in I \cup E : a_i^T x \leq \alpha_i\} \\ I_2(x) &= \{i \in I \cup E : a_i^T x > \alpha_i\} \end{aligned}$$

Řešíme posloupnost úloh lineárního programování

$$\begin{aligned} x^* &= \arg\min_{x \in C} \sum_{i \in I_2(x)} (a_i^T x - \alpha_i) \\ C &= \left\{x \in R^n : a_i^T x \leq \alpha_i \; i \in I_1(x), \; a_i^T x \geq \alpha_i, \; i \in I_2(x)\right\}. \end{aligned}$$

Řešením každé této úlohy je bod, ve kterém se alespoň jedno porušené omezení stane aktivním $\Rightarrow$ po konečném počtu kroků dostaneme přípustný bod.

Kvadratické programování

Máme řešit úlohu

$$\begin{aligned} x^* &= \arg\min_{x \in C} \left(\frac{1}{2} x^T G x + g^T x\right) \\ C &= \{x \in R^n : a_i^T x \leq \alpha_i, \; i \in I, \; a_i^T x = \alpha_i, \; i \in E\} \end{aligned}$$

Použijeme Newtonovu metodu s lineárními omezeními (takže $B = G$).

- Optimální délka kroku $\alpha = 1$ vede k nalezení minima na lineární varietě.
- Pokud $\overline{\alpha} \leq 1$ přidáváme nová aktivní omezení

Metody rekursivního kvadratického programování

Definice 60 *Úlohou kvadratického programování (QP) přiřazenou úloze (NP) v bodě $x \in R^n$ nazýváme nalezení vektoru Δx, který minimalizuje kvadratickou funkci*

$$\frac{1}{2}(\Delta x)^T B \Delta x + (\nabla f(x))^T \Delta x$$

(kde B je aproximací $G(x,u)$) za podmínek

$$\begin{aligned} c_I(x) + A_I^T(x)\Delta x &\leq 0 \\ c_E(x) + A_E^T(x)\Delta x &= 0 \end{aligned}$$

Poznámka 97 *Nechť $B = G(x,u)$. Označíme-li $u + \Delta u$ Lagrangeovy multiplikátory úlohy (QP), můžeme KKT podmínky úlohy (QP) zapsat ve tvaru*

$$\begin{aligned} g(x, u + \Delta u) + G(x,u)\Delta x &= 0 \\ c_i(x) + a_i^T(x)\Delta x &\leq 0, \quad i \in I \\ u_i + \Delta u_i &\geq 0, \quad i \in I \\ (u_i + \Delta u_i)(c_i(x) + a_i^T(x)\Delta x) &= 0, \quad i \in I \\ c_i(x) + a_i^T(x)\Delta x &= 0, \quad i \in E \end{aligned}$$

které vzniknou linearizací KKT podmínek úlohy (NP).

Poznámka 98 Úloha (QP) nemusí mít řešení i když úloha (NP) má řešení. Tento nedostatek lze odstranit tak, že se omezení v úloze (QP) nahradí oslabenými omezeními

$$\begin{aligned} \beta^l c_I(x) + A_I^T(x)\Delta x &\leq 0 \\ \beta^l c_E(x) + A_E^T(x)\Delta x &= 0 \end{aligned}$$

kde $0 < \beta < 1$ a l je nejmenší přirozené číslo takové, že modifikovaná úloha (QP) má řešení.

Definice 61 *Metody rekursivního kvadratického programování (RQP) jsou iterační a jejich iterační krok má tvar*

$$\begin{aligned} x^+ &= x + \alpha \Delta x \\ u_I^+ &= u_I + \alpha \Delta u_I \\ u_E^+ &= u_E + \alpha \Delta u_E \end{aligned}$$

kde Δx, Δu_I, Δu_E jsou směrové vektory určené řešením úlohy (QP) a $\alpha > 0$ je délka kroku.

Poznámka 99 Nechť $x^* \in C$ je bod, ve kterém jsou splněny postačující podmínky druhého řádu (Věta 98). Pak existuje okolí $B(x^*, \varepsilon) \subset R^n$ takové, že $\overline{E}(x) = \overline{E}(x^*)$ $\forall x \in B(x^*, \varepsilon)$. Proto se v případě lokální konvergence můžeme omezit na omezení ve tvaru rovnosti

$$c_i(x) = 0, \quad i \in \overline{E} = \overline{E}(x^*)$$

Použijeme označení $\overline{P} = I - \overline{A}(\overline{A}^T\overline{A})^{-1}\overline{A}^T = \overline{Z}\overline{Z}^T$ (kde $\overline{A} = \overline{A}(x)$ a $\overline{Z} = \overline{Z}(x)$).

Věta 105 *Nechť $\{x_i\} \subset R^n$, $\{u_i\} \subset R^m$ jsou posloupnosti získané metodou RQP (Definice 61) s $\alpha_i = 1$, $i \in N$, takové, že $x_i \to x^*$, $u_i \to u^*$, kde (x^*, u^*) je KKT pár úlohy (NP) vyhovující postačujícím podmínkám 2.řádu s LICQ a SC. Pak $x_i \to x^*$ Q-superlineárně právě tehdy, jestliže*

$$\frac{\|\overline{P}_i(B_i - G(x^*, u^*))(x_{i+1} - x^*)\|}{\|x_{i+1} - x^*\|} \to 0$$

Důsledek 8 *Newtonova metoda s $B_i = G(x_i, u_i)$ a $\alpha_i = 1$ je Q-superlineárně konvergentní (za předpokladu, že $x_i \to x^*$, $u_i \to u^*$).*

Poznámka 100 Zatímco podmínky pro superlineární konvergenci lze v případě Newtonovy metody snadno splnit, je obtížnější zajistit globální konvergenci této metody. K zajištění globální kovergence se používají exaktní pokutové funkce.

Definice 62 *Funkci*

$$P_\sigma(x) = F(x) + \sigma \|c^0(x)\|_P$$

kde $\sigma > 0$,

$$\begin{aligned} c_i^0(x) &= \max(c_i(x), 0), \quad & i \in I \\ c_i^0(x) &= c_i(x), & i \in E \end{aligned}$$

a $\|\cdot\|_P$ je nějaká (primární) norma, nazveme exaktní pokutovou funkcí úlohy (NP).

Věta 106 *Nechť (x^*, u^*) je KKT pár úlohy (NP) vyhovující postačujícím podmínkám 2.řádu s LICQ a SC a nechť $\sigma > \|u^*\|_D$, kde $\|\cdot\|_D$ je norma duální k normě $\|\cdot\|_P$. Pak $P_\sigma(x)$ má lokální minimum v x^*.*

Poznámka 101 Exaktní pokutovou funkci úlohy (NP) můžeme použít k výběru délky kroku. Nechť

$$P(\alpha) = P_\sigma(x + \alpha\Delta x)$$

Délku kroku volíme tak, aby byla splněna podmínka

$$P(\alpha) - P(0) \le \varepsilon_1 \alpha P'(0)$$

(Armijo). Musí však platit $P'(0) < 0$.

Věta 107 *Nechť $P(\alpha) = P_\sigma(x + \alpha\Delta x)$ a*

$$\sigma > \|u^+\|_D - \frac{(\Delta x)^T G(x, u)\Delta x}{\|c^0(x)\|_P}$$

Pak platí $P'(0) < 0$.

Poznámka 102 Metody RQP s exaktní pokutovou funkcí lze realizovat tak, že jsou globálně konvergentní. Exaktní pokutová funkce však kazí superlineární konvergenci, neboť ani v blízkém okolí řešení neplatí $P(1) < P(0)$ (Maratosův jev), takže nelze použít jednotkovou délku kroku.

Poznámka 103 K výběru délky kroku je výhodnější použít rozšířenou Lagrangeovu funkci

$$P(\alpha) = F(x + \alpha\Delta x) + (u + \Delta u)^T c^0(x + \alpha\Delta x) + \frac{\sigma}{2}\|c^0(x + \alpha\Delta x)\|^2$$

V tomto případě nelze obecně dokázat globální konvergenci metody.

Poznámka 104 Metody RQP jsou vhodné pro menší úlohy. Velké řídké úlohy vyžadují kvalitní řešiče velkých řídkých úloh (QP), které nejsou vždy k dispozici.

Metody vnitřních bodů

Myšlenka: Úloha (NP) se převede na posloupnost úloh (IP) závislých na parametru μ, přičemž $\mu \to 0$.

Definice 63 *Nechť $s_I \in R^{m_I}$, $s_I > 0$ a $\mu > 0$. V úloze (IP) (závislé na parametru μ) hledáme minimum barierové funkce*

$$B(x,s) = F(x) - \mu e^T \ln(S_I) e$$

s omezeními

$$\begin{aligned} c_I(x) + s_I &= 0, \quad i \in I \\ c_E(x) &= 0, \quad i \in E \end{aligned}$$

Přitom $S_I = \mathrm{diag}\,(s_i, i \in I)$ a e je vektor, jehož prvky jsou jednotky.

Věta 108 *Vektor $(x, s_I) \in R^{n+m_I}$ je KKT bodem úlohy (IP), existují-li vektory $u_I \in R^{m_I}$, $u_E \in R^{m_E}$ takové, že*

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x,u) &= 0 \\ S_I U_I e &= \mu e \\ c_I(x) + s_I &= 0 \\ c_E(x) &= 0 \end{aligned}$$

kde $L(x,u)$ je Lagrangeova funkce (stejná jako v Definici 57).

Poznámka 105 Derivováním barierové funkce bychom dostali rovnici $U_I e = \mu S_I^{-1} e$. Rovnice $S_I U_I e = \mu e$ je výhodnější (vede na efektivnější algoritmy).

Poznámka 106 Linearizací KKT podmínek dostaneme krok Newtonovy metody.

$$\begin{bmatrix} G & 0 & A_I & A_E \\ 0 & U_I & S_I & 0 \\ A_I^T & I & 0 & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta s_I \\ \Delta u_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ S_I U_I e - \mu e \\ c_I + s_I \\ c_E \end{bmatrix}$$

kde $g = g(x,u)$ a $G = G(x,u)$. Tuto rovnici lze redukovat eliminací vektoru Δs_I. Platí

$$\Delta s_I = -M_I(u_I + \Delta u_I) + \mu U_I^{-1} e$$

kde $M_I = U_I^{-1} S_I$, takže

$$\begin{bmatrix} G & A_I & A_E \\ A_I^T & -M_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta u_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ c_I + \mu U_I^{-1} e \\ c_E \end{bmatrix}$$

Definice 64 *Nechť $x \in R^n$, $s_I \in R^{m_I}$ a $u_I \in R^{m_I}$. Pak množiny*

$$\begin{aligned} \hat{I}(x, s_I, u_I) &= \{i \in I, s_i \le \varepsilon_I u_i\} \\ \check{I}(x, s_I, u_I) &= \{i \in I, s_i > \varepsilon_I u_i\} \end{aligned}$$

kde $\varepsilon_I > 0$, nazveme množinami indexů aktivních a neaktivních omezení.

Poznámka 107 Eliminací neaktivních omezení dostaneme

$$\Delta \check{u}_I = \check{M}_I^{-1}(\check{c}_I + \check{A}_I^T \Delta x) + \mu \check{S}_I^{-1} e$$

takže

$$\begin{bmatrix} \hat{G} & \hat{A}_I & A_E \\ \hat{A}_I^T & -\hat{M}_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta \hat{u}_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \hat{g} \\ \hat{c}_I + \mu \hat{U}_I^{-1} e \\ c_E \end{bmatrix} \tag{IPS}$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{G} &= G + \check{A}_I \check{M}_I^{-1} \check{A}_I^T \\ \hat{g} &= g + \check{A}_I \check{M}_I^{-1} \check{c}_I + \mu \check{A}_I \check{S}_I^{-1} e \end{aligned}$$

Dále

$$\begin{aligned} \Delta \hat{s}_I &= -\hat{M}_I(\hat{u}_I + \Delta \hat{u}_I) + \mu \hat{U}_I^{-1} e \\ \Delta \check{s}_I &= -(\check{c}_I + \check{A}_I^T \Delta x + \check{s}_I) \end{aligned}$$

Nejprve určíme Δx, $\Delta \hat{u}_I$, Δu_E (nepřesným) řešením soustavy (IPS) a vypočteme vektor $\Delta \hat{s}_i$. Pak vypočteme $\Delta \check{u}_I$ a $\Delta \check{s}_I$.

Poznámka 108 Matice $\hat{G}$ a $\hat{M}$ jsou omezené (předpokládáme, že G a $\check{A}_I$ jsou omezené) a jsou-li splněny podmínky SC, platí

$$\hat{M}_I \to 0$$

Poznámka 109 Matice v (IPS) je symetrická a indefinitní. Soustavu (IPS) lze efektivně řešit metodou sdružených gradientů s předpodmiňovačem

$$C = \begin{bmatrix} \hat{D} & \hat{A}_I & A_E \\ \hat{A}_I^T & -\hat{M}_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

kde $\hat{D}$ je diagonální positivně definitní matice (aproximace matice $\hat{G}$).

Poznámka 110 K výběru délky kroku se používá rozšířená barierová Lagrangeova funkce

$$\begin{aligned} P(\alpha) &= F(x + \alpha \Delta x) - \mu e^T \ln(S_I + \alpha \Delta S_I) e \\ &\quad + (u_I + \Delta u_I)^T (c_I(x + \alpha \Delta x) + s_I + \alpha \Delta s_I) + (u_E + \Delta u_E)^T c_E(x + \alpha \Delta x) \\ &\quad + \frac{\sigma}{2} \|c_I(x + \alpha \Delta x) + s_I + \alpha \Delta s_I)\|^2 + \frac{\sigma}{2} \|c_E(x + \alpha \Delta x)\|^2 \end{aligned}$$

kde $\sigma > 0$.

Věta 109 *Nechť Δx a Δs_I jsou vektory určené podle Poznámky 107 a nechť*

$$\sigma > - \frac{(\Delta x)^T G \Delta x + (\Delta s_I)^T S_I^{-1} U_I \Delta s_I}{\|c_E\|^2 + \|c_I + s_I\|^2}$$

Pak řešíme-li soustavu (IPS) dostatečně přesně, platí $P'(0) < 0$.

Poznámka 111 Požadujeme, aby platilo $s_I + \alpha \Delta s_I > 0$, $u_I + \alpha \Delta u_I > 0$. Z tohoto důvodu se určí horní meze

$$\begin{aligned} \overline{\alpha}_s &= \gamma \min_{i \in I, \Delta s_i < 0} \left(-\frac{s_i}{\Delta s_i} \right) \\ \overline{\alpha}_u &= \gamma \min_{i \in I, \Delta u_i < 0} \left(-\frac{u_i}{\Delta u_i} \right) \end{aligned}$$

kde $0 < \gamma < 1$ (např. $\gamma = 0.99$). Pak

$$\begin{aligned} s_I^+ &= s_I + \min(\alpha, \overline{\alpha}_s) \Delta s_I \\ u_I^+ &= u_I + \min(\alpha, \overline{\alpha}_u) \Delta u_I \end{aligned}$$

Poznámka 112 Parametr μ se přepočítává v každém iteračním kroku. Podle Věty 108 by mělo platit $S_I U_I e = \mu e$. Proto volíme

$$\mu = \lambda \frac{s_I^T u_I}{m_I}$$

kde $0 < \lambda < 1$. Používají se různé heuristické vzorce, například

$$\lambda = 0.1 \left[\min \left(0.05 \frac{1-\rho}{\rho}, 2 \right) \right]^3$$

kde

$$\rho = \frac{\min_{i \in I} s_i u_i}{\frac{s_I^T u_I}{m_i}}$$

(míra centrality).

Metody nehladkých rovnic

Myšlenka: Nelineární KKT systém se (pomocí Fischerovy-Burmeisterovy funkce) převede na systém polohladkých rovnic a ten se řeší pomocí Newtonovy metody.

Poznámka 113 Fischerova-Burmeisterova funkce má tvar

$$\psi(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} - (x_1 + x_2)$$

(a) $\psi(x_1, x_2) = 0$ platí právě tehdy, jestliže $x_1 \geq 0$, $x_2 \geq 0$, $x_1 x_2 = 0$

(b) V bodě, kde $x_1 x_2 \neq 0$ platí

$$\nabla \psi(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} - 1 \\ \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} - 1 \end{bmatrix}$$

V bodě, kde $x_1 x_2 = 0$, je $\psi(x_1, x_2)$ polohladká a $[-1, -1]^T \in \partial \psi(0, 0)$, kde $\partial \psi(0, 0)$ značíme subdiferenciál funkce ψ v bodě $(0, 0)$. Označíme-li $r(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$ pro $x_1 x_2 \neq 0$ a $r(x_1, x_2) = 1$ pro $x_1 x_2 = 0$, je vždy

$$\begin{bmatrix} \frac{x_1}{r(x_1, x_2)} - 1 \\ \frac{x_2}{r(x_1, x_2)} - 1 \end{bmatrix} \in \partial \psi(x_1, x_2)$$

Poznámka 114 Použijeme-li Fischerovu-Burmeisterovu funkci, můžeme nelineární KKT systém

$$\begin{aligned} g(x,u) &= 0 \\ c_i(x) &\le 0, \quad u_i \ge 0, \quad u_i c_i(x) = 0, \quad i \in I \\ c_i(x) &= 0, \quad i \in E \end{aligned}$$

převést na systém polohladkých rovnic

$$\begin{aligned} g(x,u) &= 0 \\ \psi(u_i, -c_i(x)) &= 0, \quad i \in I \\ c_i(x) &= 0, \quad i \in E \end{aligned}$$

Poznámka 115 Budeme používat označení z Definice 59 a položíme

$$R_I = \operatorname{diag}\{r_i, i \in I\} = \operatorname{diag}\left\{\sqrt{u_i^2 + c_i^2}, i \in I\right\}$$

Poznámka 116 Linearizací polohladkých rovnic dostaneme krok Newtonovy metody

$$\begin{bmatrix} G & A_I & A_E \\ (R_I + C_I)R_I^{-1}A_I^T & -(R_I - U_I)R_I^{-1} & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta u_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ \psi_I \\ c_E \end{bmatrix}$$

kde $g = g(x,u)$ a $G = G(x,u)$. Tuto rovnici lze symetrizovat vynásobením diagonální maticí diag $(I,\, R_I(R_I + C_I)^{-1},\, I)$. Platí

$$\begin{bmatrix} G & A_I & A_E \\ A_I^T & -M_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta u_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} g \\ R_I(R_I + C_I)^{-1}\psi_I \\ c_E \end{bmatrix}$$

kde $M_I = (R_I + C_I)^{-1}(R_I - U_I)$.

Definice 65 *Nechť $x \in R^n$, $u_I \in R^{m_I}$. Pak množiny*

$$\begin{aligned} \hat{I}(x,\, u_I) &= \{i \in I : r_i - u_i \le \varepsilon_I(r_i + c_i)\} \\ \check{I}(x,\, u_I) &= \{i \in I : r_i - u_i > \varepsilon_I(r_i + c_i)\} \end{aligned}$$

kde $\varepsilon_I > 0$, nazveme množinami indexů aktivních a neaktivních omezení.

Poznámka 117 Podmínka $r_i - u_i \le \varepsilon_I(r_i + c_i)$ je ekvivalentní podmínce

$$-\frac{\partial \psi_i}{\partial u_i} \le \varepsilon_I \frac{\partial \psi_i}{\partial c_i}$$

Věta 110 *Nechť $x^* \in C$ je KKT bodem úlohy (NP), ve kterém jsou splněny podmínky LICQ a SC. Pak existují okolí $\mathcal{N} \subset R^n$ a $\mathcal{M}_I \subset R^{m_I}$ vektorů x^* a u_I^* taková, že*

$$\begin{aligned} c_i(x^*) = 0 \;&\Rightarrow\; i \in \hat{I}(x, u_I) \\ u_i^* = 0 \;&\Rightarrow\; i \in \check{I}(x, u_I) \end{aligned}$$

pokud $x \in \mathcal{N}$ a $u_I \in \mathcal{M}_I$. Pokud $x \to x^*$ a $u_I \to u_I^*$, pak

$$\begin{aligned} c_i(x^*) = 0 \;&\Rightarrow\; \frac{r_i - u_i}{r_i + c_i} \to 0 \\ u_i^* = 0 \;&\Rightarrow\; \frac{r_i - u_i}{r_i + c_i} \to \infty \end{aligned}$$

Poznámka 118 Eliminací neaktivních omezení dostaneme

$$\Delta\check{u}_I = \check{M}_I^{-1}[(\check{R}_I + \check{C}_I)^{-1}\check{R}_I\check{\psi}_I + \check{A}_I^T\Delta x]$$

takže

$$\begin{bmatrix} \hat{G} & \hat{A}_I & A_E \\ \hat{A}_I^T & -\hat{M}_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta\hat{u}_I \\ \Delta u_E \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \hat{g} \\ (\hat{R}_I + \hat{C}_I)^{-1}\hat{R}_I\hat{\psi}_I \\ c_E \end{bmatrix} \qquad \text{(NES)}$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{G} &= G + \check{A}_I\check{M}_I^{-1}\check{A}_I^T \\ \hat{g} &= g + \check{A}_I\check{M}_I^{-1}(\check{R}_I + \check{C}_I)^{-1}\check{R}_I\check{\psi}_I \end{aligned}$$

Nejprve určíme Δx, $\Delta\hat{u}$, Δu_E (nepřesným řešením soustavy (NES)). Pak vypočteme $\Delta\check{u}$.

Poznámka 119 Soustavy (NES) a (IPS) mají velmi podobné vlastnosti. Platí opět Poznámky 108 a 109.

Poznámka 120 K výběru délky kroku se používá rozšířená Lagrangeova funkce

$$\begin{aligned} P(\alpha) &= F(x+\alpha\Delta x) \\ &\quad +(u_I+\Delta u_I)^T c_I(x+\alpha\Delta x) + (u_E+\Delta u_E)^T c_E(x+\alpha\Delta x) \\ &\quad +\frac{\sigma}{2}\|\psi_I(u_I+\alpha\Delta u_I,\ -c_I(x+\alpha\Delta x))\|^2 + \frac{\sigma}{2}\|c_E(x+\alpha\Delta x)\|^2 \end{aligned}$$

kde $\sigma > 0$.

Věta 111 *Nechť Δx a Δu_I jsou vektory určené podle Poznámky 118 a nechť*

$$\sigma > -\frac{(\Delta x)^T G \Delta x}{\|\psi_I\|^2 + \|c_E\|^2}$$

*Pak řešíme-li soustavu (*NES*) dostatečně přesně, platí $P'(0) < 0$.*

Řešení lineárních KKT systémů

Soustava

$$K\overline{d} = \begin{bmatrix} \hat{G} & \hat{A}_I & A_E \\ \hat{A}_I^T & -\hat{M}_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d \\ \hat{d}_I \\ d_E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ \hat{b}_I \\ b_E \end{bmatrix} = \overline{b} \qquad \text{(K)}$$

Předpodmiňovač

$$C = \begin{bmatrix} \hat{D} & \hat{A}_I & A_E \\ \hat{A}_I^T & -\hat{M}_I & 0 \\ A_E^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{(P)}$$

kde $\hat{D}$ je positivně definitní diagonální aproximace matice $\hat{G}$ (např. její diagonála).

Algoritmus 9 *(metoda PCG)*

Data: $0 \le \omega < 1$, $\overline{d} \in R^{n+\hat{m}_I+m_E}$ *(např.* $\overline{d} = 0$*)*.
Set $\overline{r} := \overline{b} - K\overline{d}$, $\beta := 0$
While $\|\overline{r}\| > \omega\|\overline{b}\|$ **do**

$$\begin{array}{lll} \tilde{r} := C^{-1}\overline{r}, & \gamma := \overline{r}^T\tilde{r}, & \beta := \beta\gamma \\ \overline{p} := \tilde{r} + \beta\overline{p}, & \overline{q} := K\overline{p}, & \alpha := \gamma/\overline{p}^T\overline{q} \\ \overline{d} := \overline{d} + \alpha\overline{p}, & \overline{r} := \overline{r} - \alpha\overline{q}, & \beta := 1/\gamma \end{array}$$

end while

Poznámka 121 Matice K je indefinitní. Metoda CG může selhat. Předpodmiňovač C je také indefinitní. Kompenzuje indefinitnost matice K.

Věta 112 *Uvažujme předpodmiňovač* (P) *aplikovaný na soustavu* (K) *a předpokládejme, že* $\hat{G} - \hat{D}$ *je regulární. Pak matice* KC^{-1} *má alespoň* $\hat{m}_I + 2m_E$ *jednotkových vlastních čísel, ale nanejvýš* $\hat{m}_I + m_E$ *jim odpovídajících lineárně nezávislých vlastních vektorů. Zbylá vlastní čísla matice* KC^{-1} *jsou vlastními čísly matice*

$$Z_E^T\tilde{G}Z_E(Z_E^T\tilde{D}Z_E)^{-1}$$

kde $[A_E, Z_E]$ *je regulární,* $Z_E^TA_E = 0$, $Z_E^TZ_E = I$, *a kde*

$$\begin{aligned} \tilde{G} &= \hat{G} + \hat{A}_I\hat{M}_I^{-1}\hat{A}_I^T \\ \tilde{D} &= \hat{D} + \hat{A}_I\hat{M}_I^{-1}\hat{A}_I^T \end{aligned}$$

Je-li $Z_E^T\tilde{G}Z_E$ *positivně definitní, jsou všechna vlastní čísla kladná.*

Věta 113 *Uvažujme předpodmiňovač* (P) *aplikovaný na systém* (K) *a předpokládejme, že matice* $\hat{G} - \hat{D}$ *je regulární. Pak Krylovův prostor*

$$\mathcal{K} = \operatorname{span}\{\overline{r}, KC^{-1}\overline{r}, (KC^{-1})^2\overline{r}, \dots\}$$

má dimenzi nejvýše $\min(n+1, n-m_E+2)$.

Věta 114 *Uvažujme Algoritmus 9 s předpodmiňovačem* (P) *aplikovaný na systém* (K). *Předpokládejme, že počáteční* $\overline{d} \in R^{n+\hat{m}_I+m_E}$ *je zvolen tak, že* $\hat{r}_I = 0$ *a* $r_E = 0$. *Nechť* $Z_E^T\tilde{G}Z_E$ *je positivně definitní. Pak*

(a) Vektor d^* *(první část vektoru* $\overline{d}^*$, *který je řešením soustavy* (K)*) je nalezen po nejvýše* $n - m_E$ *iteracích.*

(b) Algoritmus nemůže skončit na dělení nulou dříve, než je nalezen vektor d^*.

(c) Chyba $\|d - d^*\|$ *konverguje k nule přinejmenším R-lineárně s kvocientem*

$$q \le \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1}$$

kde κ *je spektrální číslo podmíněnosti matice* $Z_E^T\tilde{G}Z_E(Z_E^T\tilde{D}Z_E)^{-1}$.

(d) Jestliže $d = d^*$, *pak také* $\hat{d}_I = \hat{d}_I^*$ *a* d_E^* *lze určit podle vzorce*

$$d_E^* = d_E + (A_E^T\tilde{D}^{-1}A_E)^{-1}A_E^T\tilde{D}^{-1}r$$

Řešení zobecněných minimaxových úloh

Definice 66 *Řekneme, že $F : R^n \to R$ je zobecněnou minimaxovou funkcí, jestliže*

$$F(x) = h(F_1(x), \ldots, F_m(x)), \quad F_i(x) = \max_{1 \le j \le n_i} f_{ij}(x), \quad 1 \le i \le m,$$

kde $h : R^m \to R$ and $f_{ij} : R^n \to R$, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le n_i$, jsou hladké funkce splňující tyto předpoklady.

Předpoklad 1. Funkce $F_i(x)$, $1 \le i \le m$, jsou zdola omezené na R^n (existují čísla $\underline{F}_i \in R$ taková, že $F_i(x) \ge \underline{F}_i$, $1 \le i \le m$, pro všechna $x \in R^n$).

Předpoklad 2. Funkce $h \in C^2 : R^m \to R$ je konvexní a platí

$$\partial h(z)/\partial z_i \ge \underline{h}_i > 0, \quad 1 \le i \le m,$$

pro všechna $z \in Z = \{z \in R^m : z_i \ge \underline{F}_i,\ 1 \le i \le m\}$.

Předpoklad 3. Funkce $f_{ij}(x)$, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le n_i$, jsou dvakrát spojitě diferencovatelné na konvexním obalu množiny

$$\mathcal{L}(\overline{F}) = \{x \in R^n : F_i(x) \le \overline{F},\ 1 \le i \le m\}$$

pro dostatečně velkou horní mez $\overline{F}$ a mají omezené první a druhé derivace na conv $\mathcal{L}(\overline{F})$ (existují čísla $\overline{g}$ a $\overline{G}$ taková, že $\|\nabla f_{ij}(x)\| \le \overline{g}$, $\|\nabla^2 f_{ij}(x)\| \le \overline{G}$, $1 \le i \le m$, $1 \le j \le n_i$, pro všechna $x \in \mathrm{conv}\mathcal{L}(\overline{F})$).

Příklad 15 *Nejjednodušší zobecněnou minimaxovou funkcí je součet*

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} F_i(x) = \sum_{i=1}^{m} \max_{1 \le j \le n_i} f_{ij}(x).$$

V tomto případě $\partial h(z)/\partial z_i = 1$, $1 \le i \le m$, pro libovolný vektor z a matice $H(z)$ je diagonální. Pro $m = 1$ dostaneme klasickou minimaxovou úlohu.

$$F(x) = \max_{1 \le i \le m} f_i(x).$$

Příklad 16 *Volbou $F_i(x) = |f_i(x)| = \max(f_i(x), -f_i(x))$, $1 \le i \le m$ dostaneme funkci obsahující absolutní hodnoty. Klasickým případem je součet absolutních hodnot*

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} |f_i(x)|.$$

Poznámka 122 Minimalizace funkce $F(x)$ je ekvivalentní úloze nelineárního programování: minimalizovat funkci

$$h(z_1, \ldots, z_m)$$

s omezeními

$$f_{ij}(x) \le z_i, \quad 1 \le i \le m, \quad 1 \le j \le n_i$$

(podmínky $\partial h(z)/\partial z_i \geq \underline{h}_i > 0$, $1 \leq i \leq m$, pro $z \in Z$ postačují k tomu, aby platilo $z_i = F_i(x)$, $1 \leq i \leq m$, v bodě minima). Nutné KKT podmínky pro řešení této úlohy mají tvar

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} u_{ij}\nabla f_{ij}(x) = 0, \quad \sum_{j=1}^{n_i} u_{ij} = \frac{\partial h(z)}{\partial z_i},$$

$$u_{ij} \geq 0, \quad z_i - f_{ij}(x) \geq 0, \quad u_{ij}(z_i - f_{ij}(x)) = 0,$$

kde u_{ij}, $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n_i$, jsou Lagrangeovy multiplikátory.

Poznámka 123 Úlohu nelineárního programování lze řešit primární metodou vnitřních bodů: aplikujene Newtonovu metodu na posloupnost barierových funkcí

$$B_\mu(x,z) = h(z) - \mu \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \log(z_i - f_{ij}(x)),$$

kde $\mu > 0$ a $\mu \to 0$.

Poznámka 124 Nutné KKT podmínky pro extrém bariérové funkce mají tvar

$$\nabla_x B_\mu(x,z) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \nabla f_{ij}(x)\frac{\mu}{z_i - f_{ij}(x)} = 0,$$

$$\frac{\partial B_\mu(x,z)}{\partial z_i} = \frac{\partial h(z)}{\partial z_i} + \sum_{j=1}^{n_i} \frac{\mu}{z_i - f_{ij}(x)} = 0, \quad 1 \leq i \leq m.$$

Poznámka 125 Minimalizaci bariérové funkce můžeme chápat jako dvojúrovňovou optimalizaci

$$z(x) = \arg\min_{z \in Z} B_\mu(x,z),$$

$$x = \arg\min_{x \in R^n} B(x;\mu), \quad B(x;\mu) \triangleq B_\mu(x, z(x)),$$

kde Z je množina použitá v předpokladu 2.

Věta 115 *Soustava*

$$\frac{\partial h(z)}{\partial z_i} - \sum_{j=1}^{n_i} \frac{\mu}{z_i - f_{ij}(x)} = 0, \tag{MS}$$

má pro pevné $x \in R^n$ jednoznačné řešení $z(x;\mu) \in Z \subset R^m$ takové, že

$$F_i(x) < \underline{z}_i \leq z_i(x;\mu) \leq \overline{z}_i, \quad 1 \leq i \leq m,$$

kde

$$\underline{z}_i = F_i(x) + \mu/\overline{h}_i, \quad \overline{z}_i = F_i(x) + n_i\mu/\underline{h}_i,$$

a kde $\underline{h}_i > 0$ jsou meze použité v předpokladu 2 a $\overline{h_i} = h_i(\overline{z}_1, \ldots, \overline{z}_m)$.

Umíme-li najít řešení soustavy nelineárních rovnic, můžeme se omezit na nepodmíněnou minimalizaci funkce $B(x;\mu) = B_\mu(x, z(x))$. Je účelné znát gradient a Hessovu matici funkce $B(x;\mu)$.

Věta 116 *Označme*

$$u_{ij}(x) = \frac{\mu}{z_i - f_{ij}(x)}, \quad v_{ij}(x) = \frac{\mu}{(z_i - f_{ij}(x))^2}, \quad 1 \le i \le m, \quad 1 \le j \le n_i.$$

Pak

$$\nabla B(x;\mu) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \nabla f_{ij}(x) u_{ij}(x),$$

$$\nabla^2 B(x;\mu) = W(x, z(x)) - C(x, z(x)) D(x, z(x))^{-1} C^T(x, z(x)),$$

kde

$$W(x,z) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \nabla^2 f_{ij}(x) u_{ij}(x) + \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \nabla f_{ij}(x) v_{ij}(x) (\nabla f_{ij}(x))^T,$$

$$C(x,z) = \left[\sum_{j=1}^{n_1} \nabla f_{ij}(x) v_{ij}(x), \ldots, \sum_{j=1}^{n_m} \nabla f_{ij}(x) v_{ij}(x)\right],$$

$$D(x,z) = \nabla^2 h(z) + \operatorname{diag}\left(\sum_{j=1}^{n_1} v_{ij}(x), \ldots, \sum_{j=1}^{n_m} v_{ij}(x)\right).$$

Věta 117 *Nechť matice* $G = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} \nabla^2 f_{ij}(x) u_{ij}(x)$ *je pozitivně definitní. Pak matice* $\nabla B(x;\mu)$ *je pozitivně definitní.*

Poznámka 126 Platí

$$\begin{aligned}(\nabla^2 B(x;\mu))^{-1} \;&=\; W(x, z(x))^{-1} - W(x, z(x))^{-1} C(x, z(x)) \\ &\quad \left(C^T(x, z(x))\, W^{-1}(x, z(x))\, C(x, z(x)) - D(z(x))\right)^{-1} \\ &\quad C^T(x, z(x))\, W(x, z(x))^{-1}.\end{aligned}$$

Poznámka 127 Iterační krok primární metody vnitřních bodů vypadá takto:

- Na začátku iteračního kroku zmáme $x \in R^n$ a $\mu > 0$.
- Řešením soustavy (MS) určíme vektor $z(x;\mu)$.
- Určíme směrový vektor $s = -(\nabla^2 B(x;\mu))^{-1} \nabla B(x;\mu)$.
- Určíme délku kroku $\alpha > 0$ tak, aby platilo $B_\mu(x + \alpha s, z(x + \alpha s;\mu)) < B_\mu(x, z(x;\mu))$ (vektor $z(x + \alpha s;\mu)$ se určuje řešením soustavy (MS)).
- Položíme $x^+ = x + \alpha \Delta x$ a určíme novou hodnotu $0 < \mu^+ < \mu$.

Poznámka 128 Určení nové hodnoty $0 < \mu^+ < \mu$:

- Pokud $\|g(x_k;\mu_k)\|^2 \ge \rho\mu_k$, položíme $\mu_{k+1} = \mu_k$ (bariérový parametr se nemění).
- Pokud $\|g(x_k;\mu_k)\|^2 < \rho\mu_k$, položíme $\mu_{k+1} = \max(\underline{\mu}, \|g_k(x_k;\mu_k)\|^2)$.

Používají se hodnoty $\underline{\mu} = 10^{-10}$ a $\rho = 0.1$.

Věta 118 *Nechť jsou splněny předpoklady 1–3. Pak primární metoda vnitřních bodů pro minimalizaci zobecněné minimaxové funkce je globálně konvergentní.*

Lipschitzovské funkce

Definice 67 *Řekneme, že funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$ (s konstantou L), jestliže existuje číslo $\varepsilon > 0$ takové, že platí*

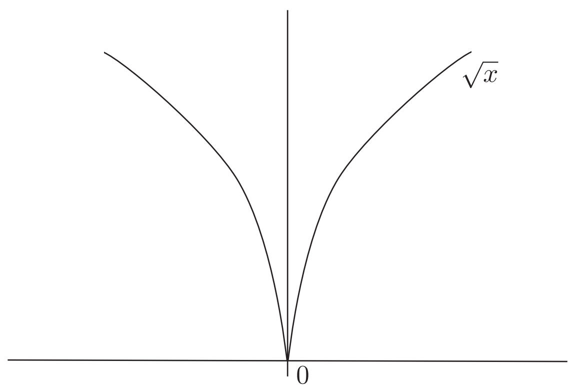
$$|F(x_2) - F(x_1)| \leq L\|x_2 - x_1\|, \tag{5}$$

pokud $x_1 \in B(x, \varepsilon)$ a $x_2 \in B(x, \varepsilon)$.

Příklad 17 *Funkce $\sqrt{x}$ není lipschitzovská v okolí bodu $x = 0$. Platí*

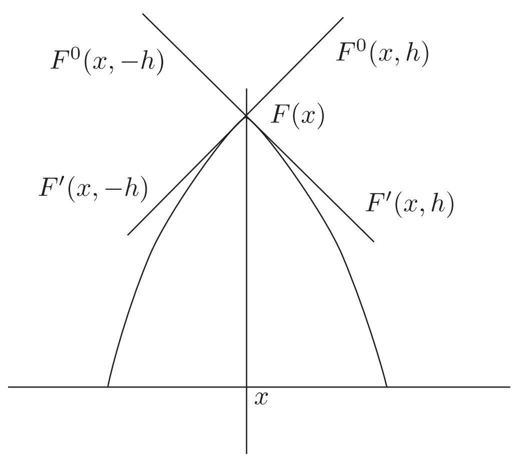
$$\sqrt{x_2} - \sqrt{x_1} = \frac{x_2 - x_1}{\sqrt{x_2} + \sqrt{x_1}},$$

takže pro libovolné číslo $L > 0$ platí $\sqrt{x_2} - \sqrt{x_1} > L(x_2 - x_1)$, pokud $x_1 < 1/(2L)$ a $x_2 < 1/(2L)$.



Definice 68 *Zobecněnou (Clarkovu) směrovou derivaci funkce $F : R^n \to R$ v bodě $x \in R^n$ ve směru $h \in R^n$ definujeme předpisem*

$$F^0(x, h) = \limsup_{\substack{y \to x \\ t \downarrow 0}} \frac{F(y + th) - F(y)}{t}. \tag{6}$$



Věta 119 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská (s konstantou L) v okolí bodu $x \in R^n$. Pak:*

(a) Funkce $F^0(x, \cdot) : R^n \to R$ je pozitivně homogenní, subaditivní a lipschitzovská s konstantou L.

(b) Funkce $F^0(\cdot, \cdot) : R^n \times R^n \to R$ je shora polospojitá, neboli

$$\limsup_{i \to \infty} F^0(x_i, h_i) \leq F^0(x, h),$$

kdykoliv $x_i \to x$ a $h_i \to h$.

(c) Platí $F^0(x, -h) = (-F)^0(x, h)\ \forall h \in R^n$.

Definice 69 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$. Pak množinu*

$$\partial F(x) = \{g \in R^n : F^0(x, h) \geq g^T h \quad \forall h \in R^n\}$$

nazveme subdiferenciálem funkce F v bodě x. Prvky $g \in \partial F(x)$ budeme nazývat subgradienty funkce F v bodě x.

Poznámka 129 Nechť funkce $F : R^n \to R$ je konvexní v okolí bodu $x \in R^n$. Pak platí

$$\begin{aligned} F^0(x, h) &= F'(x, h) \quad \forall h \in R^n, \\ \partial F(x) &= \left\{g \in R^n : F'(x, h) \geq g^T h \quad \forall h \in R^n\right\} \end{aligned}$$

(oba subdiferenciály splývají).

Definice 70 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$. Jestliže $F'(x, h)$ existuje a platí $F^0(x, h) = F'(x, h)\ \forall h \in R^n$, řekneme, že F je regulární v bodě x.*

Věta 120 *Spojitě diferencovatelné a konvexní funkce jsou regulární. Dále jsou regulární:*
(a) Nezáporné lineární kombinace regulárních funkcí, tedy funkce tvaru

$$F(x) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x).$$

(b) Bodová maxima regulárních funkcí, tedy funkce tvaru

$$F(x) = \max_{1 \leq i \leq m} f_i(x).$$

(kde $\lambda_i \geq 0$ a f_i jsou regulární).

Věta 121 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská (s konstantou L) v okolí bodu $x \in R^n$. Pak:*

(a) *Subdiferenciál $\partial F(x)$ je neprázdná konvexní kompaktní množina taková, že $\|g\| \leq L$ $\forall g \in \partial f(x)$.*

(b) *Platí*

$$F^0(x,h) = \max\left\{g^T h : g \in \partial F(x)\right\} \quad \forall h \in R^n.$$

(c) *Subdiferenciál je shora polospojitý (jestliže $x_i \to x$, $g_i \in \partial F(x_i)$ a $g_i \to g$, pak $g \in \partial F(x)$).*

(d) *Platí $\partial(-F)(x) = -\partial F(x)$.*

Poznámka 130 Podle věty 121 (b) je zobecněná směrová derivace $F^0(x,h)$ opěrnou funkcí subdiferenciálu $\partial F(x)$, neboli

$$F^0(x,h) = \delta_{\partial F(x)}(h).$$

Příklad 18 *Nechť $F(x) = -\|x\|$. Pak*

$$F^0(0,h) = -\|0,h\|^0 = \|0,-h\|^0 = \|0,-h\|' = \|h\|,$$

$$\partial F(0) = -\partial\|0\| = \partial\|0\| = \{g \in R^n : \|g\| \leq 1\}.$$

Věta 122 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je spojitě diferencovatelná v bodě $x \in R^n$. Pak F je lipschitzovská v okolí bodu x a platí*

$$\partial F(x) = \{\nabla F(x)\}\,. \tag{7}$$

Věta 123 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lokálně lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$, který je jejím lokálním extrémem (minimem nebo maximem). Pak platí*

$$0 \in \partial F(x).$$

Věta 124 *(o střední hodnotě). Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lokálně lipschitzovská na otevřené množině obsahující úsečku $[x,y]$. Pak existuje bod $z \in (x,y)$ takový, že*

$$F(y) - F(x) \in (\partial F(z))^T(y-x).$$

Definice 71 *Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lokálně lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$. Pak množinu*

$$\partial_B F(x) = \left\{\lim_{i\to\infty} \nabla F(x_i) : x_i \to x,\ \nabla F(x_i) - existuje\right\}$$

nazveme B-diferenciálem funkce F.

Věta 125 *(Clarke). Nechť funkce $F : R^n \to R$ je lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$. Pak platí*

$$\partial F(x) = \text{conv}\ \partial_B F(x).$$

Příklad 19 *Nechť $\|.\| : R^n \to R$ je euklidovská norma. Pak $\|.\|$ je spojitě diferencovatelná v každém bodě $x \neq 0$ (platí $\nabla\|x\| = x/\|x\|$). Jestliže $x_i = t_i h$, pak*

$$\lim_{t_i \downarrow 0} \nabla\|x_i\| = \lim_{t_i \downarrow 0} \frac{t_i h}{t_i\|h\|} = \frac{h}{\|h\|}$$

takže

$$\partial_B\|0\| = \left\{ \frac{h}{\|h\|} : h \in R^n \right\}$$

(jednotková sféra) a

$$\partial\|0\| = \text{conv}\partial_B\|0\| = \{h \in R^n : \|h\| \leq 1\}$$

(uzavřená jednotková koule).

Lipschitzovská zobrazení

Je-li zobrazení $f : R^n \to R^m$ spojitě diferencovatelné v bodě $x \in R^n$, existuje Jacobiova matice

$$\mathcal{J}f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Je-li zobrazení $f : R^n \to R^m$ lokálně lipschotzovské, má množina bodů v nichž $\mathcal{J}$ neexistuje míru nula (Rademacherova věta). Proto je opodstatněná tato definice.

Definice 72 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Pak množinu*

$$\partial f(x) = \text{conv}\ \partial_B f(x),$$

kde

$$\partial_B f(x) = \left\{ \lim_{i\to\infty} \mathcal{J}f(x_i) : x_i \to x,\ \mathcal{J}f(x_i) - existuje \right\},$$

nazveme zobecněným Jakobiánem zobrazení f.

Věta 126 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské (s konstantou L) v okolí bodu $x \in R^n$. Pak*

(a) Platí

$$\partial f(x) \subset \begin{bmatrix} \partial f_1(x) \\ \ldots \\ \partial f_m(x) \end{bmatrix},$$

kde $\partial f_i(x)$ jsou subdiferenciály složek $f_i : R^n \to R$, $1 \leq i \leq m$, v bodě $x \in R^n$.

(b) Zobecněný Jakobián $\partial f(x)$ je neprázdná konvexní kompaktní množina taková, že $\|J\| \le L \; \forall J \in \partial f(x)$.

(c) Zobecněný Jakobián $\partial f(x)$ je shora polospojitý (jestliže $x_i \to x$, $J_i \in \partial f(x_i)$ a $J_i \to J$, pak $J \in \partial f(x)$).

Poznámka 131 Nechť $[x, y]$ je uzavřený interval. Zavedeme označení

$$\partial f\left([x,y]\right) = \operatorname{conv} \bigcup_{z \in [x,y]} \partial f(z).$$

Množina $\partial f\left([x,y]\right)$je kompaktní a konvexní.

Věta 127 *(o střední hodnotě). Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lokálně lipschitzovské na otevřené množině obsahující úsečku $[x, y]$. Pak platí*

$$f(y) - f(x) \in \partial f\left([x,y]\right)(y - x).$$

Věta 128 *(o složeném zobrazení). Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$ a funkce $F : R^m \to R$ je lipschitzovská v okolí bodu $f(x)$. Pak funkce $\varphi = F \circ f : R^n \to R$ (t.j. $\varphi(x) = F(f(x))$) je lipschitzovská v okolí bodu $x \in R^n$ a platí*

$$\partial\varphi(x) \subset \operatorname{conv} \left\{ J^T v : J \in \partial f(x), v \in \partial F(f(x)) \right\},$$

přičemž rovnost nastává například tehdy, když:

(a) Funkce F je spojitě diferencovatelná v bodě $f(x)$.

(b) Funkce F je regulární v bodě $f(x)$ a zobrazení f je spojitě diferencovatelné v bodě x.

(c) Funkce F je regulární v bodě $f(x)$, složky $f_i : R^n \to R$, $1 \le i \le m$, jsou regulární v bodě x a pro libovolný prvek $v \in \partial F(f(x))$ platí $v \ge 0$ (t.j. $v_i \ge 0$, $1 \le i \le m$).

Důsledek 9 *Nechť funkce $f_1 : R^n \to R$, $f_2 : R^n \to R$ jsou lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Pak funkce $\varphi = f_1 f_2$ je lipschitzovská v okolí bodu x a platí*

$$\partial\varphi(x) \subset \partial f_1(x) f_2(x) + f_1(x) \partial f_2(x)$$

přičemž rovnost nastává, jsou-li funkce f_1, f_2 regulární a platí-li $f_1(x) \ge 0$, $f_2(x) \ge 0$. V tomto případě je funkce $\varphi = f_1 f_2$ regulární.

Důsledek 10 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Pak funkce $\varphi = (1/2) f^T f$ je lipschitzovská v okolí bodu x a platí*

$$\partial\varphi(x) = \left\{ J^T f(x) : J \in \partial(f(x)) \right\}.$$

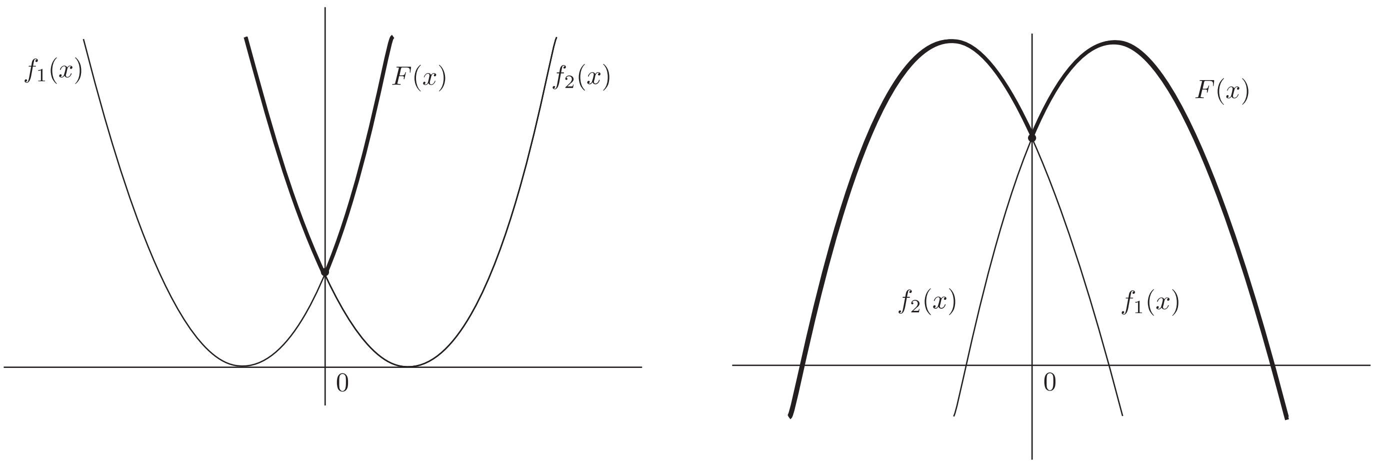
Věta 129 *Nechť funkce $f_i : R^n \to R$, $1 \le i \le m$, jsou lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Pak funkce*

$$\varphi(x) = \max_{1\le i\le m} f_i(x)$$

je lipschitzovská v okolí bodu x a platí

$$\partial\varphi(x) \subset \operatorname{conv} \{\partial f_i(x) : i \in I(x)\},$$

kde $I(x) = \{i \in \{1,\dots,m\} : f_i(x) = \varphi(x)\}$. Jsou-li funkce f_i, $1 \le i \le m$, regulární v bodě x, je funkce φ regulární v bodě x a místo inkluze platí rovnost.



$F(x) = \max(f_1(x), f_2(x))$

Polohladká zobrazení

Definice 73 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Jestliže pro každé $h \in R^n$ existuje limita*

$$\lim_{\substack{J\in\partial f(x+th')\\ h'\to h, t\downarrow 0}} Jh'$$

(nezávislá na volbě $J \in \partial f(x + th')$), řekneme, že zobrazení f je polohladké v bodě x.

Věta 130 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je polohladké v bodě $x \in R^n$. Pak pro libovolný vektor $h \in R^n$ existuje směrová derivace*

$$f'(x,h) = \lim_{t\downarrow 0} \frac{f(x+th) - f(x)}{t}$$

a platí

$$f'(x,h) = \lim_{\substack{J\in\partial f(x+th')\\ h'\to h,\, t\downarrow 0}} Jh'.$$

Věta 131 *Zobrazení, jehož složky jsou spojitě diferencovatelné, konvexní nebo polohladké je polohladké.*

Věta 132 *(o složeném zobrazení). Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je polohladké v bodě $x \in R^n$ a funkce $F : R^m \to R$ je polohladká v bodě $f(x)$. Pak složené zobrazení $\varphi = F \circ f$ je polohladké v bodě x.*

Důsledek 11 *Nechť funkce $f_i : R^n \to R$, $1 \le i \le m$, jsou polohladké v bodě $x \in R^n$ a $\lambda_i \in R$, $1 \le i \le m$. Pak například tyto funkce jsou polohladké:*

(a) Lineární kombinace

$$\varphi = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i$$

(b) Součin

$$\varphi = \prod_{i=1}^{m} f_i$$

(c) Libovolná norma

$$\varphi = \left\| \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \dots \\ f_m(x) \end{bmatrix} \right\|,$$

tedy například

$$\varphi = \sum_{i=1}^{m} |f_i| \quad \textit{nebo} \quad \varphi = \max_{1 \le i \le m} |f_i|$$

(d) Bodové maximum

$$\varphi = \max_{1 \le i \le m} f_i$$

Důsledek 12 *Složky polohladkého zobrazení jsou polohladké funkce. Lineární kombinace polohladkých zobrazení je polohladké zobrazení. Skalární součin polohladkých zobrazení je polohladká funkce.*

Příklad 20 *Fischerova–Burmeisterova funkce $\psi : R^2 \to R$ je definovaná předpisem*

$$\psi(x) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} - (x_1 + x_2)$$

(a) $\psi(x) = 0$ platí právě tehdy, když $x_1 \ge 0$, $x_2 \ge 0$ a $x_1 x_2 = 0$. Skutečně

$$x_1 < 0 \;\Rightarrow\; \psi(x) = \sqrt{|x_1|^2 + x_2^2} + |x_1| - x_2 \ge |x_1| + |x_2| - x_2 > 0,$$

$$x_2 < 0 \;\Rightarrow\; \psi(x) = \sqrt{x_1^2 + |x_2|^2} - x_1 + |x_2| \ge |x_1| - x_1 + |x_2| > 0,$$

$$x_1 > 0,\; x_2 > 0 \;\Rightarrow\; \psi(x) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} - (x_1 + x_2) < \sqrt{x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2} - (x_1 + x_2) = 0,$$

$$x_1 = 0,\; x_2 \ge 0 \;\Rightarrow\; \psi(x) = |x_2| - x_2 = 0,$$

$$x_1 \ge 0,\; x_2 = 0 \;\Rightarrow\; \psi(x) = |x_1| - x_1 = 0.$$

(b) V bodě $x \ne 0$ je $\psi(x)$ spojitě diferencovatelná a platí

$$\nabla\psi(x) = \begin{bmatrix} \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} - 1 \\ \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} - 1 \end{bmatrix}.$$

V bodě $x = 0$ je $\psi(x)$ polohladká (je rozdílem konvexní funkce $\sqrt{x_1^2 + x_2^2}$ a lineární funkce $x_1 + x_2$. Platí

$$\partial_B \psi(0) = \bigcup_{\varphi \in [0,2\pi]} [\cos\varphi - 1,\ \sin\varphi - 1] = S(-e, 1)$$

(jednotková sféra se středem v bodě $[-1, -1]$) a

$$\partial\psi(0) = \mathrm{conv}\partial_B\psi(0) = \mathrm{conv}S(-e, 1) = \overline{B(-e, 1)}$$

(uzavřená jednotková koule se středem v bodě $[-1, -1]$).

Věta 133 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je lipschitzovské v okolí bodu $x \in R^n$. Pak f je polohladké v bodě x právě tehdy, existuje-li směrová derivace $f'(x, h)$ a platí-li*

$$Jh - f'(x, h) = o\left(\|h\|\right)$$

pokud $h \to 0$ a $J \in \partial f(x + h)$.

Věta 134 *Nechť zobrazení $f : R^n \to R^m$ je polohladké v bodě $x \in R^n$. Pak platí*

$$f(x + h) - f(x) - f'(x, h) = o\left(\|h\|\right)$$

a

$$f(x + h) - f(x) - Jh = o\left(\|h\|\right).$$

pokud $h \to 0$ a $J \in \partial f(x + h)$.

Poznámka 132 Věty 133–134 mají velký význam pro řešení polohladkých rovnic. Vyplývá z nich, že prvky zobecněného Jakobiánu $\partial f(x)$ dobře vystihují chování polohladkého zobrazení $f(x)$, takže k řešení rovnice $f(x) = 0$ lze použít Newtonovu metodu, která místo Jacobiovy matice používá libovolný prvek zobecněného Jakobiánu.