

9 Generalità sugli algoritmi di ottimizzazione

I problemi di ottimizzazione che si presentano nella pratica sono di solito così complessi che non è possibile determinarne una soluzione per via analitica. La complessità è determinata innanzi tutto dal numero di variabili e di vincoli, che definiscono la *dimensione* del problema; e poi dalla eventuale presenza di funzioni non lineari tra le funzioni f, g_i, h_j . La soluzione analitica è possibile solo nel caso di poche variabili e di funzioni estremamente semplici, e cioè solo nei casi che si utilizzano come esempi ed esercizi nei testi e sulla lavagna.

Nella pratica, per risolvere un problema di ottimizzazione occorre fare ricorso ad un *algoritmo iterativo*, cioè ad un programma di calcolo che, data una approssimazione corrente x^k della soluzione, determina, con una appropriata sequenza di operazioni, una nuova approssimazione x^{k+1} . A partire da una approssimazione iniziale x^0 si determina così una successione $\{x^k\}$.

Occorre però a questo punto mettere in evidenza una limitazione intrinseca degli algoritmi di ottimizzazione, che consiste nel fatto che, per come sono costruiti, sono in grado di determinare solo punti che, per un dato problema, ne soddisfano le condizioni necessarie di ottimalità: cioè solo punti dell'insieme Ω introdotto nel §7.1. Se si denota con \mathcal{X} l'insieme delle soluzioni locali del problema, risulta evidentemente $\mathcal{X} \subseteq \Omega \subseteq \mathcal{F}$. Le prestazioni di un algoritmo vanno perciò valutate in relazione alla sua capacità di determinare punti di Ω , che, in questo contesto, viene detto *insieme bersaglio*, piuttosto che in relazione alla capacità di determinare punti di \mathcal{X} .

Con *convergenza* dell'algoritmo si intende appunto la sua capacità di centrare, con la successione $\{x^k\}$ che genera, l'insieme bersaglio Ω . L'algoritmo si dice *convergente* se fornisce un punto di Ω dopo un numero finito di iterazioni, o almeno, al limite, per $k \rightarrow \infty$. Nel primo caso si parla di convergenza *finita*, nel secondo di convergenza *asintotica*.

La convergenza finita si consegue solo per problemi particolari e algoritmi specifici per questi; ad esempio, l'algoritmo del simplesso per la Programmazione Lineare ha convergenza finita. Gli algoritmi per la Programmazione Nonlineare hanno in generale convergenza asintotica.

Ovviamente, per un algoritmo con convergenza asintotica, non sarà possibile in pratica eseguire un numero infinito di iterazioni, e occorre quindi prevedere una *criterio d'arresto* e cioè una regola che interrompa l'esecuzione dell'algoritmo dopo un numero finito di iterazioni. Il criterio d'arresto di solito si basa sul riconoscere di avere trovato, se non proprio un punto di Ω , almeno una sua buona approssimazione. Ad esempio, per il Problema (2), sappiamo che $\Omega = \{\omega \in \mathbb{R}^n : \nabla f(\omega) = 0\}$; quindi dato un ϵ sufficientemente piccolo, si può pensare di arrestare l'algoritmo al primo valore di k per cui risulti $\|\nabla f(x^k)\| < \epsilon$.

Nell'ambito della convergenza asintotica, si possono avere differenti caratterizzazioni della convergenza dell'algoritmo, a seconda del comportamento della successione $\{x^k\}$ per $k \rightarrow \infty$. Un primo caso si ha se l'intera successione è *convergente* a un punto $\omega \in \Omega$; cioè se $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \omega \in \Omega$. Un tale comportamento, per quanto auspicabile, non sempre è realizzabile. Un secondo caso si ha quando la successione $\{x^k\}$ ha almeno un *punto limite* (o punto di accumulazione) $\omega \in \Omega$, e cioè quando è possibile estrarre dalla successione almeno una sottosuccessione (anche detta successione estratta) $x^{k_j}, j = 1, 2, \dots$ che risulti convergente a un punto $\omega \in \Omega$.

Poiché se una successione converge ad un punto $\omega \in \Omega$ anche tutte le sue sottosuccessioni devono convergere allo stesso punto ω , è evidente che nel primo caso l'algoritmo deve soddisfare requisiti molto più stringenti che nel secondo. Tuttavia, nella pratica, anche

il secondo comportamento è più che soddisfacente; infatti, tenuto conto di quanto detto a proposito del criterio d'arresto, si ha che, se $\{x^k\}$ ha almeno un punto limite in Ω , è sempre possibile trovare, per k sufficientemente grande, un punto x^k che approssimi un punto di Ω con la precisione desiderata.

Ovviamente la successione $\{x^k\}$ può poi avere più di un punto limite, sia in Ω che fuori di Ω .

Un'altra caratterizzazione della convergenza di un algoritmo si ha in relazione alla scelta di x^0 . Per alcuni algoritmi, la convergenza ad un punto $\omega \in \Omega$ si consegue qualunque sia $x^0 \in \mathbb{R}^n$; in questo caso si dice che l'algoritmo ha convergenza *globale*. Per altri algoritmi, la convergenza ad un punto $\omega \in \Omega$ è assicurata solo se $x^0 \in \mathcal{S}$, essendo \mathcal{S} un intorno sferico aperto di ω ; in questo caso si dice che l'algoritmo ha convergenza *locale*. Notiamo che quando si parla di convergenza globale (locale) di un algoritmo, *non si intende* convergenza ad una soluzione globale (locale) del problema.

Si consideri ad esempio il semplice problema:

$$\min_{x \in \mathbb{R}} x^2 \tag{91}$$

la cui soluzione è ovviamente $x^* = 0$.

Un algoritmo per risolverlo può essere dato dal procedimento iterativo Alg1 definito da

$$\text{Alg1 : } x^{k+1} = \frac{x^k}{2}$$

A partire da un $x^0 \in \mathbb{R}$, otteniamo:

$$\begin{aligned} x^1 &= x^0/2, \\ x^2 &= x^1/2 = x^0/4, \\ x^3 &= x^2/2 = x^0/8, \\ x^4 &= x^3/2 = x^0/16, \end{aligned}$$

e così via; quindi, per un k generico, abbiamo $x^k = x^0/2^k$. È evidente che la successione che si ottiene converge a $x^* = 0$, soluzione del problema, qualunque sia x^0 ; quindi Alg1 converge, e converge globalmente.

Un secondo algoritmo per risolvere il problema dell'esempio può essere dato dal procedimento iterativo Alg2 definito da

$$\text{Alg2 : } x^{k+1} = \frac{x^k}{(k+1)}$$

A partire da un $x^0 \in \mathbb{R}$, otteniamo:

$$\begin{aligned} x^1 &= x^0, \\ x^2 &= x^1/2 = x^0/2, \\ x^3 &= x^2/3 = x^0/(2 \times 3), \\ x^4 &= x^3/4 = x^0/(2 \times 3 \times 4), \end{aligned}$$

e così via; quindi, per un k generico, abbiamo $x^k = x^0/k!$. Anche in questo caso, è evidente che la successione che si ottiene converge globalmente a $x^* = 0$, soluzione del problema.

Consideriamo ora, sempre per il problema dell'esempio, un terzo algoritmo Alg3, definito dall'iterazione

$$\text{Alg3 : } x^{k+1} = (x^k)^2$$

A partire da $x^0 \in \mathbb{R}$, otteniamo:

$$\begin{aligned}x^1 &= (x^0)^2, \\x^2 &= (x^1)^2 = (x^0)^4, \\x^3 &= (x^2)^2 = (x^0)^8, \\x^4 &= (x^3)^2 = (x^0)^{16},\end{aligned}$$

e così via; quindi, per un k generico, abbiamo $x^k = (x^0)^{2^k}$. In questo caso, se assumiamo $x^0 = 1$, otteniamo $x^k = 1$ per ogni k . Quindi la successione che si ottiene è convergente, ma ad un punto $x^* = 1 \notin \Omega$. Se assumiamo $x^0 = 2$ la successione che si ottiene è evidentemente divergente. Se si assume $x^0 = 1/2$, si ottiene $x^k = \frac{1}{2^{2^k}}$, e in questo caso la successione che si ottiene converge a $x^* = 0$. Si può facilmente verificare che la successione converge alla soluzione del problema $x^* = 0$ se, e solo se, $x^0 \in (-1, 1)$. Quindi Alg3 è un algoritmo che converge solo localmente.

Nel valutare le prestazioni di un algoritmo, oltre alla convergenza, occorre poi prendere in considerazione la sua *rapidità di convergenza* (velocità di convergenza). Infatti dati due algoritmi che risolvono lo stesso problema, il numero di iterazioni richiesto affinché il criterio di arresto sia soddisfatto può risultare molto diverso.

Nella valutazione della rapidità di convergenza si assume, eventualmente estraendo una sottosuccessione convergente ad un punto limite $\omega \in \Omega$, che la successione $\{x^k\}$ prodotta dall'algoritmo risulti convergente ad $\omega \in \Omega$; cosicché risulti $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \omega$, e quindi $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^k - \omega\| = 0$.

Il metodo più utilizzato per valutare la rapidità di convergenza ad ω della successione $\{x^k\}$ si basa sull'analisi di come si riduce il termine $\|x^{k+1} - \omega\|$ rispetto al termine $\|x^k - \omega\|$; si basa cioè sull'analisi del rapporto $\|x^{k+1} - \omega\|/\|x^k - \omega\|$.

Si dice che l'algoritmo ha rapidità di convergenza:

- *lineare*, se esiste un $c \in (0, 1)$ tale che, per k abbastanza grande, si ha:

$$\frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|} \leq c;$$

- *superlineare*, se si ha:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|} = 0;$$

- *quadratica*, se esiste un $c > 0$ tale che, per k abbastanza grande, si ha:

$$\frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|^2} \leq c.$$

Si verifica facilmente che se un algoritmo converge superlinearmente, converge anche linearmente; e se converge quadraticamente converge anche superlinearmente. Quindi la convergenza quadratica è più rapida di quella superlineare, e la superlineare è più rapida della lineare.

Se consideriamo di nuovo il Problema (91), ricordando che $\omega = 0$ vediamo che:

- per Alg1 si ha:

$$\frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|} = \frac{x^0/2^{k+1}}{x^0/2^k} = \frac{1}{2},$$

e quindi Alg1 converge linearmente;

- per Alg2 si ha:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x^0 / (k+1)!}{x^0 / k!} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k+1} = 0,$$

e quindi Alg2 converge superlinearmente;

- per Alg3 si ha, direttamente dalla definizione:

$$\frac{\|x^{k+1} - \omega\|}{\|x^k - \omega\|^2} = \frac{x^{k+1}}{(x^k)^2} = 1,$$

e quindi Alg3 converge quadraticamente.

Per $k = 1, 2, \dots, 5$ a partire dallo stesso $x^0 = 1/2$, otteniamo con i tre algoritmi i valori di x^k riportati nella Tabella 1. Se poi poniamo $k = 10$ risulta, rispettivamente per Alg1, Alg2, Alg3: $x^{10} = 4.88 \times 10^{-4}$, $x^{10} = 1.37 \times 10^{-7}$, $x^{10} = 5,56 \times 10^{-309}$ (!). Quindi si constata che Alg3 è più veloce di Alg2, e Alg2 è più veloce di Alg1.

$x^0 = \frac{1}{2}$	x^1	x^2	x^3	x^4	x^5
Alg1	0.25	0.125	0.0625	0.03215	0.015625
Alg2	0.5	0.25	0.08333	0.020833	0.004166
Alg3	0.25	0.0625	0.0039	1.5×10^{-5}	2.32×10^{-9}

Table 1: rapidità di convergenza

Osserviamo a questo punto che un algoritmo di ottimizzazione deve essere in grado di risolvere non un problema particolare, come il Problema (91), ma una intera classe di problemi: ad esempio un algoritmo di ottimizzazione non vincolata deve potersi applicare a tutti i problemi della forma (2), qualunque sia la funzione $f(x)$ continuamente differenziabile; e le proprietà di convergenza e rapidità di convergenza dell'algoritmo debbono valere per l'intera classe. Gli algoritmi Alg1, Alg2, Alg3 sono stati introdotti a titolo puramente esemplificativo con riferimento al Problema (91), ma nessuno di essi può essere considerato un algoritmo di ottimizzazione: infatti nessuno di essi è in grado di risolvere il problema $\min_{x \in \mathbb{R}} (x-1)^2$, che è evidentemente dello stesso tipo del Problema (91).

Osserviamo inoltre che, da un punto di vista pratico, le considerazioni analitiche sulla rapidità di convergenza non sono sufficienti a stabilire che un algoritmo ha prestazioni migliori di un altro, in quanto tengono conto solo del numero delle iterazioni, e non di quanto ogni iterazione sia onerosa da un punto di vista computazionale. Come vedremo nel seguito, in generale la singola iterazione di un algoritmo con rapidità lineare richiede calcoli molto più semplici di quelli richiesti da un algoritmo con rapidità quadratica. In pratica quindi occorre cercare un compromesso conveniente, tra l'esigenza di non effettuare troppe iterazioni, e quella di avere iterazioni non troppo onerose.

Domande

1) Sia dato il problema: $\min_{x \in \mathbb{R}} \sin \pi x$; e l'algoritmo Alg definito da:

$$\text{Alg} : x^{k+1} = \begin{cases} \frac{x^k}{2} & k = 0, 2, 4 \dots (\text{interi pari}), \\ 1 - \frac{x^k}{2} & k = 1, 3, 5 \dots (\text{interi dispari}) \end{cases}$$

Sai analizzarne le caratteristiche di convergenza? E di rapidità di convergenza?

2) Sai verificare che un algoritmo che converge superlinearmente converge anche linearmente? E che un algoritmo che converge quadraticamente converge anche superlinearmente?

3) Per il problema dell'esempio (91), ammettiamo come criterio di arresto che per la derivata della funzione obiettivo risulti $|df(x^k)/dx| \leq 10^{-6}$. Assumendo $x^0 = 1/2$, dopo quante iterazioni si arresteranno Alg1, Alg2 e Alg3?

4) Nella pratica implementazione degli algoritmi, occorre sempre dare un numero massimo di iterazioni K , raggiunto il quale l'algoritmo viene comunque arrestato. Per il problema dell'esempio (91), ammettiamo dunque che l'arresto avvenga o se $|df(x^k)/dx| \leq 10^{-12}$, o se $k = K = 30$. Assumendo $x^0 = 1/2$, quale delle due condizioni si verificherà prima?

10 Algoritmi per l'ottimizzazione non vincolata

10.1 Introduzione

Consideriamo il problema di ottimizzazione non vincolata:

$$\min_{x \in R^n} f(x) \tag{92}$$

in cui $f : R^n \rightarrow R$. Nel seguito supporremo sempre valida la seguente ipotesi:

Ipotesi 1 *La funzione $f : R^n \rightarrow R$ è una funzione continuamente differenziabile ed esiste un $x^0 \in R^n$ tale che l'insieme di livello \mathcal{L}_{x^0} sia compatto.*

È noto che, sotto l'ipotesi 1, il Problema (92) ammette un punto di minimo globale $x^* \in \mathcal{L}_{x^0}$ e che ogni punto di minimo locale di f in \mathcal{L}_{x^0} è un *punto stazionario* di f , ossia un punto in cui si annulla il gradiente.

Gli algoritmi che prenderemo in considerazione consentono, in generale, soltanto la determinazione di punti stazionari di f , ossia di punti dell'insieme bersaglio $\Omega := \{\omega \in R^n : \nabla f(\omega) = 0\}$. In generale si riesce a garantire che, se x^0 non è già un punto stazionario, vengano comunque ottenuti punti stazionari in cui la funzione obiettivo assume un valore inferiore al valore assunto nel punto iniziale x^0 e ciò consente di ottenere soluzioni soddisfacenti in molte applicazioni.

Se poi la funzione obiettivo è convessa, la determinazione di un punto stazionario risolve completamente il problema, poiché, come è noto, ogni punto stazionario di una funzione convessa è un punto di minimo globale.

Gli algoritmi che ci proponiamo di studiare possono essere descritti per mezzo dello schema concettuale seguente:

Schema generico di algoritmo di ottimizzazione non vincolata

1. Si fissa un *punto iniziale* $x^0 \in R^n$ e si pone $k = 0$.
2. Se $x^k \in \Omega$ stop.
3. Si calcola una *direzione di ricerca* $d^k \in R^n$.
4. Si calcola un *passo* $\alpha^k \in R$ lungo d^k ;
5. Si determina un nuovo punto $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$. Si pone $k = k + 1$ e si ritorna al Passo 2.

Dal punto di vista geometrico l'algoritmo si può descrivere come una successione di spostamenti (definiti dagli scalari α^k) lungo le direzioni di ricerca d^k , effettuati a partire da x^0 .

Gli algoritmi che consideriamo sono algoritmi *di discesa* ovvero garantiscono che

$$f(x^k + \alpha^k d^k) < f(x^k). \quad (93)$$

Commentiamo brevemente lo schema considerato.

1. **Scelta del punto iniziale.** Il punto iniziale dell'algoritmo è un *dato* del problema e deve essere fornito in relazione alla particolare funzione che si intende minimizzare. Il punto x_0 dovrebbe essere scelto come la migliore stima disponibile della soluzione ottima, eventualmente facendo riferimento a un modello semplificato della funzione obiettivo. Nella maggior parte dei casi, tuttavia, non esistono criteri generali per effettuare una buona scelta di x^0 e quindi siamo interessati a definire algoritmi le cui proprietà di convergenza siano indipendenti dalla scelta del punto iniziale (algoritmo *globalmente* convergente).

Nella soluzione di problemi applicativi può essere conveniente ripetere la ricerca a partire da punti iniziali differenti, ad esempio generati casualmente, e scegliere poi il punto stazionario migliore tra quelli così determinati.

2. **Criterio di arresto.** La verifica effettuata al Passo 2 sull'appartenenza di x^k all'insieme Ω equivale a controllare se $\nabla f(x^k) = 0$. In pratica, per l'utilizzo su calcolatore con precisione finita, occorre specificare un *criterio di arresto*.

Una prima possibilità consiste nell'arrestare l'algoritmo quando

$$\|\nabla f(x^k)\| \leq \varepsilon_1 \quad (94)$$

in cui $\varepsilon_1 > 0$ è un valore sufficientemente piccolo.

Dal punto di vista numerico tale criterio può non essere del tutto soddisfacente perché non fa riferimento né alla precisione del mezzo di calcolo, né alla scala con cui è calcolato ∇f . Nei codici di calcolo occorrerà quindi definire criteri più significativi. Osserviamo che la possibilità di utilizzare la (94) (opportunosamente rielaborata) come criterio di arresto richiede che si possa dimostrare che l'algoritmo consente

di raggiungere valori arbitrariamente piccoli di $\|\nabla f(x^k)\|$ per valori sufficientemente elevati di k .

Accanto alla condizione (94) se ne utilizzano altre

$$\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon_2 \quad |f(x^{k+1}) - f(x^k)| \leq \varepsilon_3$$

L'uso della condizione $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \varepsilon_2$ è motivata dal fatto che nel caso di convergenza superlineare la quantità $\|x^{k+1} - x^k\|$ fornisce una stima dell'errore $\|x^k - x^*\|$. In generale però questo non è vero; inoltre a volte anche spostamenti piccoli possono produrre grossi cambiamenti nel valore della funzione obiettivo. Questo è il motivo per cui si utilizza congiuntamente anche la seconda condizione.

In realtà è preferibile utilizzare la seguente modifica che consente di normalizzare rispetto ai valori assunti da f e da $\|x\|$ (con un controllo per evitare la divisione per zero):

$$\frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\max\{\|x^k\|, 1\}} \leq \varepsilon_2 \quad \frac{|f(x^{k+1}) - f(x^k)|}{\max\{|f(x^k)|, 1\}} \leq \varepsilon_3 \quad (95)$$

Le condizioni (94) e (95) sono conosciute come *criterio di Himmelblau*. Valori tipici per $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ sono $10^{-3} - 10^{-5}$.

Per quanto riguarda la scelta della norma, tra le più utilizzate ci sono $\|\cdot\|_2$ e $\|\cdot\|_\infty$.

3. **Scelta della direzione.** I criteri seguiti nella scelta della direzione di ricerca d^k individuano il particolare metodo di ottimizzazione utilizzato.

Tra i metodi esistenti, una delle distinzioni più significative è quella che fa riferimento alle informazioni disponibili sulla funzione da ottimizzare ai fini del calcolo di d^k . In particolare, possiamo distinguere:

- metodi che utilizzano soltanto le derivate prime (*metodo del gradiente, metodi delle direzioni coniugate, metodi Quasi-Newton*);
- metodi che utilizzano la conoscenza delle derivate prime e delle derivate seconde (*Metodo di Newton e relative modifiche*);
- metodi senza derivate, che si basano esclusivamente sulla valutazione della funzione obiettivo lungo direzioni di ricerca prefissate (come, ad esempio, gli assi coordinati) o definite in base ai valori della funzione obiettivo nei punti precedenti.

Nel seguito considereremo solo il metodo del gradiente, il metodo del gradiente coniugato e il metodo di Newton.

4. **Calcolo del passo.** Il calcolo dello scalare α^k costituisce la cosiddetta *ricerca unidimensionale* o *ricerca di linea* (*line search*) e viene effettuato valutando la funzione obiettivo (ed eventualmente le derivate prime) lungo la direzione d^k . Nel caso in cui la direzione di ricerca sia una direzione di discesa, e in particolare che soddisfi la condizione $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$, potremo limitarci a considerare valori di $\alpha > 0$.

Possiamo facilmente dimostrare un primo risultato per lo schema di algoritmo definito sopra.

Teorema 39 [3] *Sia $\{x^k\}$ la successione prodotta dall' algoritmo. Supponiamo che \mathcal{L}_{x^0} sia compatto e che $f(x^{k+1}) < f(x^k)$. Allora:*

- (a) *la successione $\{x^k\}$ rimane in \mathcal{L}_{x^0} ed ammette punti di accumulazione;*
- (b) *ogni punto di accumulazione di $\{x^k\}$ appartiene a \mathcal{L}_{x^0} ;*
- (c) *la successione $\{f(x^k)\}$ converge.*

Dimostrazione [3]. (NON in programma) Poiché per definizione di algoritmo di discesa $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ per ogni k , la successione rimane in \mathcal{L}_{x^0} . Inoltre per la compattezza di \mathcal{L}_{x^0} , $\{x^k\}$ ammette almeno una sottosuccessione $\{x^k\}_K$ convergente e tutte le sottosuccessioni convergenti hanno punti di accumulazione in \mathcal{L}_{x^0} . Inoltre poiché f è continua e \mathcal{L}_{x^0} è compatto, esiste il minimo x^* di f su \mathcal{L}_{x^0} e risulta quindi $f(x^k) \geq f(x^*)$ per ogni k . La successione $\{f(x^k)\}$ è monotona decrescente e limitata inferiormente e quindi converge. \square

Il risultato di convergenza riportato nel Teorema 39 non consente in generale di mettere in relazione i punti di accumulazione della successione $\{x^k\}$ prodotta dall' algoritmo con i punti dell'insieme bersaglio Ω .

In particolare la richiesta (93) di semplice riduzione della funzione f , non è sufficiente a garantire la convergenza alla soluzione, come provato nell'Esempio 15 nel paragrafo 10.3.

La scelta del passo deve garantire alcune proprietà aggiuntive. Nel seguito riportiamo due criteri per la determinazione del passo che consentono di garantire la convergenza dei metodi che considereremo successivamente.

10.2 Metodi di ricerca unidimensionale

Gli algoritmi di *ricerca unidimensionale* hanno per obiettivo la determinazione del passo α^k lungo la direzione assegnata d^k .

In termini molto generali, si può dire che la ricerca unidimensionale è finalizzata, essenzialmente, ad assicurare la convergenza globale dell' algoritmo, mentre la rapidità di convergenza dipende in prevalenza dalla scelta della direzione.

Fissati quindi x^k, d^k , la scelta dello scalare α è fatta sulla base dell'andamento di f lungo la direzione di ricerca d^k . In particolare, indicheremo con $\phi : R \rightarrow R$ la funzione di una sola variabile α definita da

$$\phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k).$$

Se f è differenziabile, esiste la derivata di $\phi(\alpha)$ rispetto ad α , indicata con $\dot{\phi}(\alpha)$, che si può porre nella forma:

$$\dot{\phi}(\alpha) = \nabla f(x^k + \alpha d^k)^T d^k, \quad (96)$$

e coincide, ovviamente, con la derivata direzionale di f lungo la direzione d^k nel punto $x^k + \alpha d^k$.

Per la ricerca unidimensionale sono disponibili diversi algoritmi che possono prevedere il calcolo del punto di minimo di $f(x^k + \alpha d^k)$ rispetto a α (*ricerca esatta*) oppure l'individuazione di un intervallo di valori accettabili ai fini dell'ottenimento della convergenza per α^k (*ricerca inesatta*).

10.2.1 Metodi di ricerca esatta

Uno dei criteri proposti per la determinazione di α^k è quello di scegliere un valore di α che minimizzi $\phi(\alpha)$ lungo la direzione d^k , ossia un valore α^k per cui si abbia:

$$f(x^k + \alpha^k d^k) \leq f(x^k + \alpha d^k), \quad \text{per ogni } \alpha \in R. \quad (97)$$

Se si assume che l'insieme di livello \mathcal{L}_{x^0} sia compatto e che $x^k \in \mathcal{L}_{x^0}$, esiste un valore di α che risolve il problema (97) cioè esiste

$$\alpha^k = \arg \min_{\alpha} \phi(\alpha).$$

Inoltre, se $\nabla f(x^k)'d^k < 0$, ossia se d^k è una direzione di discesa, si può supporre $\alpha \geq 0$ nella (97).

Poiché f è differenziabile, dovrà risultare:

$$\dot{\phi}(\alpha^k) = \nabla f(x^k + \alpha^k d^k)^T d^k = 0. \quad (98)$$

Dal punto di vista geometrico, la (98) esprime il fatto che se α^k minimizza $\phi(\alpha)$, il gradiente di f in x^{k+1} deve essere ortogonale alla direzione d^k .

In generale non è facile determinare il passo α^k che minimizza esattamente la funzione $\phi(\alpha)$ ad eccezione di alcuni casi particolari.

10.2.2 Ricerca di linea esatta nel caso quadratico

Un caso semplice in cui è possibile determinare analiticamente la soluzione del problema (97), corrisponde alla minimizzazione di una funzione quadratica strettamente convessa

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x \quad Q \succ 0.$$

In questo caso, possiamo scrivere uno sviluppo esatto di $f(x^k + \alpha d^k)$ e otteniamo

$$\phi(\alpha) = f(x^k + \alpha d^k) = f(x^k) + \alpha \nabla f(x^k)^T d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 d^{kT} Q d^k \quad (99)$$

Anche ϕ è una funzione quadratica strettamente convessa della variabile α , il cui minimo si trova annullando il gradiente, ovvero:

$$\dot{\phi}(\alpha) = \nabla f(x^k)^T d^k + \alpha d^{kT} Q d^k = 0$$

e quindi si ottiene:

$$\alpha^k = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{d^{kT} Q d^k} = -\frac{(Qx^k + c)^T d^k}{d^{kT} Q d^k}. \quad (100)$$

Osserviamo che nel caso di funzione quadratica dalla (99), possiamo sempre scrivere:

$$f(x^k + \alpha d^k) - f(x^k) = \alpha \nabla f(x^k)^T d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 d^{kT} Q d^k$$

Sostituendo l'espressione del passo α^k ottenuto con ricerca di linea esatta si ottiene:

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = -\frac{(\nabla f(x^k)^T d^k)^2}{d^{kT} Q d^k} + \frac{1}{2} \frac{(\nabla f(x^k)^T d^k)^2}{(d^{kT} Q d^k)^2} d^{kT} Q d^k = -\frac{1}{2} \frac{(\nabla f(x^k)^T d^k)^2}{d^{kT} Q d^k}$$

Quindi nel caso di minimizzazione di funzione quadratica con ricerca di linea esatta, si ottiene non solo che $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, ma l'entità della riduzione della funzione lungo la direzione d^k .

Esempio 14 Data la funzione dell'Esempio 11 del paragrafo 7.4, scrivere l'espressione di $\phi(\alpha)$ e $\dot{\phi}(\alpha)$ con x^k, d^k generici.

Soluzione. Utilizziamo l'espressione (99). Abbiamo già calcolato ∇f e $\nabla^2 f$. Indichiamo $x^k = (x_1 \ x_2)^T, d^k = (d_1 \ d_2)^T$.

$$\phi(\alpha) = x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 + \alpha \begin{pmatrix} 4x_1 + 2x_2 + 1 \\ 2x_2 + 2x_1 - 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\alpha^2 \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$$

e

$$\dot{\phi}(\alpha) = d_1(4x_1 + 2x_2 + 1) + d_2(2x_2 + 2x_1 - 1) + \alpha(2d_1^2 + d_2^2 + 2d_1d_2)$$

da cui si ottiene l'espressione

$$\alpha^k = -\frac{d_1(4x_1 + 2x_2 + 1) + d_2(2x_2 + 2x_1 - 1)}{2d_1^2 + d_2^2 + 2d_1d_2}$$

□

Esercizio 11 Data la funzione dell'Esercizio 6. Calcolare l'espressione del passo α ottenuto con una ricerca di linea esatta a partire dal punto $x = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ lungo la direzione

$$d = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}.$$

10.2.3 Metodi di ricerca inesatta: metodo di Armijo

In pratica, la *ricerca di linea esatta*, ossia la determinazione di un α^k che risolva il problema (97) è notevolmente dispendiosa, soprattutto per problemi in cui f è non convessa. D'altra parte, non esistono particolari vantaggi, dal punto di vista del funzionamento complessivo dei metodi di minimizzazione, nel determinare il punto di minimo lungo d^k . Si preferisce quindi adottare criteri "approssimati" che siano più facilmente utilizzabili dal punto di vista computazionale e garantiscano al tempo stesso opportune proprietà di convergenza.

Il *metodo di Armijo* può essere descritto per mezzo dello schema iterativo seguente:

Metodo di Armijo

Dati: $\delta \in (0, 1), \gamma \in (0, 1/2)$.

Passo 1. Si sceglie Δ^k e si pone $\alpha = \Delta^k$ e $j = 0$.

Passo 2. Se è soddisfatta la condizione

$$f(x^k + \alpha d^k) \leq f(x^k) + \gamma \alpha \nabla f(x^k)' d^k \quad (101)$$

si assume $\alpha^k = \alpha$. Stop

Passo 3. Si pone $\alpha = \delta \alpha, j = j + 1$ e si ritorna al Passo 2.

Valori tipici dei parametri sono $\delta \in [0.1, 0.5]$ e $\gamma \in [10^{-4}, 10^{-3}]$.

Osservazione 10 *Si noti che nella ricerca unidimensionale è importante utilizzare una buona stima iniziale Δ^k del passo, per ridurre il numero di valutazioni di funzione ed evitare fenomeni di overflow. Una scelta appropriata di Δ^k deve essere tuttavia effettuata in relazione al metodo utilizzato per il calcolo di d^k .*

È immediato rendersi conto che, dal punto di vista geometrico, la condizione (101) impone che α^k sia tale da assicurare che $\phi(\alpha^k)$ sia al di sotto della retta passante per $(0, \phi(0))$ e avente pendenza $\gamma\dot{\phi}(0)$, ovvero (vedi Figura 14):

$$y(\alpha) = \phi(0) + \gamma\dot{\phi}(0)\alpha.$$

La (101) si può scrivere $\phi(\alpha) \leq y(\alpha)$ ed impone quindi un *sufficiente riduzione* della funzione obiettivo.

Una condizione di *sufficiente spostamento* viene imposta implicitamente, in quanto l'algoritmo assicura che α^k sia scelto come il *più grande* valore di α per cui la (101) è soddisfatta nell'insieme:

$$A = \{\alpha : \alpha = \delta^j \Delta^k, j = 0, 1, \dots\}.$$

La condizione $\gamma < 1/2$ è motivata dall'opportunità di assicurare che, se f è una funzione quadratica, risulti accettabile il valore del passo che minimizza $\phi(\alpha)$ ed è importante, in alcuni metodi, ai fini della rapidità di convergenza.

Esercizio 12 *Dimostrare che se f è una funzione quadratica strettamente convessa, il passo (100) ottenuto con ricerca di linea esatta è accettabile secondo il criterio di Armijo.*

10.3 Il metodo del gradiente

Il *metodo del gradiente* (o *metodo della discesa più ripida*) è uno dei primi metodi proposti per la minimizzazione non vincolata e si basa sull'uso della direzione di ricerca

$$d^k = -\nabla f(x^k),$$

ossia della direzione opposta a quella del gradiente, o *antigradiente* di f in x^k .

Osserviamo che in questo caso risulta

$$\nabla f(x^k)^T d^k = -\|\nabla f(x^k)\|^2$$

e quindi se $\nabla f(x^k) \neq 0$, la direzione dell'antigradiente è sempre di discesa.

L'interesse della direzione $-\nabla f(x^k)$ risiede proprio nel fatto che, se il gradiente è continuo, come si è ipotizzato, essa costituisce una direzione di discesa che si annulla se e solo se x è un punto stazionario.

Questa proprietà assicura che con una scelta opportuna del passo α^k sia possibile stabilire facilmente un risultato di convergenza globale.

Il metodo del gradiente costituisce quindi il modello più significativo di algoritmo *globalmente convergente*.

Si può schematizzare la k -esima iterazione del metodo del gradiente come segue:

$$x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k), \quad (102)$$

in cui rimane da specificare come scegliere il passo α^k .

Osserviamo innanzitutto come la scelta del passo α^k tale da garantire una semplice riduzione della funzione obiettivo $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, non sia sufficiente a garantire la convergenza del metodo.

Esempio 15 (Non in programma) *Sia data la funzione $f : R \rightarrow R$*

$$f(x) = \begin{cases} \frac{3}{4}(1-x)^2 - 2(1-x) = \frac{1}{4}(3x^2 + 2x - 5) & \text{se } x > 1 \\ \frac{3}{4}(1+x)^2 - 2(1+x) = \frac{1}{4}(3x^2 - 2x - 5) & \text{se } x < -1 \\ x^2 - 1 & \text{se } -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

il cui gradiente è

$$\frac{df(x)}{dx} = \begin{cases} \frac{3}{2}x + \frac{1}{2} & \text{se } x > 1 \\ \frac{3}{2}x - \frac{1}{2} & \text{se } x < -1 \\ 2x & \text{se } -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Si tratta di una funzione continuamente differenziabile, convessa che ammette come unico punto di minimo il punto $x^ = 0$.*

Mostrare che il metodo del gradiente

$$x^{k+1} = x^k - \alpha \nabla f(x^k)$$

in cui il passo $\alpha \leq 1$ è scelto in modo da soddisfare un semplice criterio di riduzione della funzione obiettivo non converge al punto x^ .*

È necessario quindi definire quali regole per la scelta del passo α consentono di garantire la convergenza. Consideriamo dapprima il caso quadratico e poi il caso di funzione più generale.

10.4 Il metodo del gradiente per funzioni quadratiche

Consideriamo il caso di minimizzazione di una funzione quadratica $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$ strettamente convessa $Q \succ 0$. Abbiamo visto che in questo caso è possibile calcolare analiticamente il passo α^k con una ricerca di linea esatta e vale (100). Sostituendo l'espressione di d^k otteniamo il passo

$$\alpha^k = \frac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{\nabla f(x^k)^T Q \nabla f(x^k)}$$

Riassumendo:

Metodo del gradiente con ricerca di linea esatta

Passo 1. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$ e si pone $k = 0$.

Passo 2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo 3. Si assume

$$x^{k+1} = x^k - \frac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{\nabla f(x^k)^T Q \nabla f(x^k)} \nabla f(x^k),$$

di pone $k = k + 1$ e si ritorna al passo 2.

Osserviamo però che il metodo del gradiente con ricerca di linea esatta si muove lungo direzioni successive che sono ortogonali.

Possiamo dimostrare il seguente risultato.

Teorema 40 *Si consideri la funzione*

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x,$$

con Q matrice simmetrica e definita positiva. Il metodo del gradiente con ricerca unidimensionali esatta converge all'unico punto di minimo $x^* = -Q^{-1}c$.

Dimostrazione. Nel caso di funzione quadratica possiamo scrivere:

$$f(x^k + \alpha d^k) - f(x^k) = \alpha \nabla f(x^k)^T d^k + \frac{1}{2} \alpha^2 d^{kT} Q d^k$$

Sostituendo l'espressione del passo α^k ottenuto con ricerca di linea esatta e della direzione d^k , si ottiene:

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = -\frac{1}{2} \frac{\|\nabla f(x^k)\|^4}{\nabla f(x^k)^T Q \nabla f(x^k)} < 0$$

poiché $Q \succ 0$ e quindi il termine $\nabla f(x^k)^T Q \nabla f(x^k) > 0$.

Quindi la successione $\{x^k\}$ è tale che $f(x^{k+1}) < f(x^k)$ e dunque si mantiene in \mathcal{L}_{x^0} che è compatto. La successione $\{x^k\}$ ammette quindi almeno una sottosuccessione convergente; inoltre poiché esiste il punto di minimo x^* e risulta $f(x) \geq f(x^*)$ per ogni x , possiamo anche dire che la successione $\{f(x^k)\}$ è limitata inferiormente dal valore $f(x^*)$. Dunque $\{f(x^k)\}$ è una successione monotona decrescente e limitata inferiormente, e quindi, per la Proposizione 39, $\{f(x^k)\}$ converge ad un valore \bar{f} . Si avrà quindi

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (f(x^{k+1}) - f(x^k)) = 0.$$

Inoltre per ogni forma quadratica, vale:

$$\lambda_m \|x\|^2 \leq x^T Qx \leq \lambda_M \|x\|^2 \quad \forall x \in R^n$$

dove λ_m, λ_M indicano rispettivamente l'autovalore minimo e massimo della matrice Q e quindi in particolare possiamo anche scrivere

$$\lambda_m \|\nabla f(x^k)\|^2 \leq \nabla f(x^k)^T Q \nabla f(x^k) \leq \lambda_M \|\nabla f(x^k)\|^2 \quad \forall k$$

Ricordando che per ipotesi Q è definita positiva, si ottiene

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\frac{1}{2\lambda_M} \|\nabla f(x^k)\|^2.$$

Al limite otteniamo quindi

$$0 = \lim_{k \rightarrow \infty} (f(x^{k+1}) - f(x^k)) \leq -\frac{1}{2\lambda_M} \lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\|^2$$

e quindi

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$$

Ovvero ogni successione $\{x^k\}_K$ convergente, converge al punto x^* . Poiché x^* è l'unico punto stazionario, allora tutta la successione $\{x^k\}$ converge a x^* . \square

Per quanto riguarda la rapidità di convergenza del metodo del gradiente, vale la stima espressa dalla seguente proposizione.

Teorema 41 *Si consideri la funzione*

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x,$$

con Q matrice simmetrica e definita positiva. Il metodo del gradiente con ricerca unidimensionali esatta converge all'unico punto di minimo $x^* = -Q^{-1}c$ e si ha:

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq \left(\frac{\lambda_M}{\lambda_m}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda_M - \lambda_m}{\lambda_M + \lambda_m}\right) \|x^k - x^*\|_2, \quad (103)$$

in cui λ_M e λ_m sono, rispettivamente, il massimo e il minimo autovalore di Q .

Dimostrazione. Usando la formula di Taylor possiamo scrivere (tenendo conto che $\nabla f(x^*) = 0$)

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

Sfruttando l'ipotesi di convessità otteniamo

$$\frac{\lambda_m}{2} \|x - x^*\|^2 \leq f(x) - f(x^*) \leq \frac{\lambda_M}{2} \|x - x^*\|^2. \quad (104)$$

Posto $x(\alpha) = x^k - \alpha \nabla f(x^k)$, possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \|x(\alpha) - x^*\|^2 &= \left(x^k - \alpha \nabla f(x^k) - x^*\right)^T (x(\alpha) - x^*) = \\ &= \left[x^k - x^* - \alpha (\nabla f(x^k) - \nabla f(x^*))\right]^T (x(\alpha) - x^*). \end{aligned}$$

Usando la formula di Lagrange possiamo scrivere $(\nabla f(x^k) - \nabla f(x^*))^T (x(\alpha) - x^*) = (x^k - x^*)^T Q(x(\alpha) - x^*)$, e quindi

$$\begin{aligned} \|x(\alpha) - x^*\|^2 &= \left(x^k - x^*\right)^T (I - \alpha Q) (x(\alpha) - x^*) \\ &\leq \|I - \alpha Q\| \|x^k - x^*\| \|x(\alpha) - x^*\| \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} \|x(\alpha) - x^*\| &\leq \|I - \alpha Q\| \|x^k - x^*\| \\ &\leq \max\{|1 - \alpha\lambda_m|, |1 - \alpha\lambda_M|\} \|x^k - x^*\| = \varphi(\alpha) \|x^k - x^*\|. \end{aligned}$$

La funzione $\varphi(\alpha)$ assume valore minimo nei punti in cui $1 - \alpha\lambda_m = -(1 - \alpha\lambda_M)$ ovvero per

$$\alpha_1 = \frac{2}{\lambda_M + \lambda_m}, \quad \varphi(\alpha_1) = \frac{\lambda_M - \lambda_m}{\lambda_M + \lambda_m}.$$

Quindi possiamo scrivere

$$\|x(\alpha_1) - x^*\| \leq \left(\frac{\lambda_M - \lambda_m}{\lambda_M + \lambda_m} \right) \|x^k - x^*\|. \quad (105)$$

Dalla disequazione sinistra di (104), tenuto conto che α^k è ottenuto con una ricerca unidimensionale esatta e quindi $f(x^{k+1}) \leq f(x(\alpha))$ per ogni α , risulta:

$$\frac{\lambda_m}{2} \|x^{k+1} - x^*\|^2 \leq f(x^{k+1}) - f(x^*) \leq f(x(\alpha_1)) - f(x^*).$$

Utilizzando la disequazione destra della (104) e la (105) abbiamo ancora

$$\|x^{k+1} - x^*\|^2 \leq \frac{2}{m} [f(x(\alpha_1)) - f(x^*)] \leq \frac{\lambda_M}{\lambda_m} \|x(\alpha_1) - x^*\|^2 \leq \frac{\lambda_M}{\lambda_m} \left(\frac{\lambda_M - \lambda_m}{\lambda_M + \lambda_m} \right)^2 \|x^k - x^*\|^2$$

ovvero

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \left(\frac{\lambda_M}{\lambda_m} \right)^{1/2} \left(\frac{\lambda_M - \lambda_m}{\lambda_M + \lambda_m} \right) \|x^k - x^*\|$$

□

La stima data nella Proposizione 41 mostra che dipende, nel caso quadratico, dal rapporto

$$r = \frac{\lambda_M}{\lambda_m} \geq 1$$

tra il massimo e il minimo autovalore della matrice Hessiana Q . Si può scrivere

$$\|x^{k+1} - x^*\|_2 \leq r^{1/2} \left(\frac{r-1}{r+1} \right) \|x^k - x^*\|_2.$$

Osserviamo inoltre che, se $r = 1$, la convergenza viene ottenuta in un solo passo da ogni punto iniziale. Se $r > 1$, la convergenza può ancora essere ottenuta in un solo passo a partire da punti situati sugli assi dell'iperellissoide che definisce una superficie di livello di f , mentre esistono punti (in particolare quelli situati in prossimità dell'asse maggiore) a partire dai quali la convergenza può essere notevolmente lenta (vedi Figura ??).

La rapidità di convergenza del metodo del gradiente peggiora, in genere, al crescere di r , ossia all'aumentare del *mal condizionamento* della matrice Q .

Esempio 16 *Sia dato il problema di minimizzazione*

$$\min x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2.$$

Si scrivano le prime iterazioni del metodo del metodo del gradiente con una ricerca di linea esatta a partire dal punto iniziale

$$x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Soluzione. Si tratta della funzione studiata nell'esempio 11 il cui gradiente è

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 4x_1 + 2x_2 + 1 \\ 2x_2 + 2x_1 - 1 \end{pmatrix}$$

Iterazione 0.

$$d^0 = -\nabla f(x^0) = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Si determina il passo

$$\alpha^0 = \arg \min_{\alpha} f(x^0 + \alpha d^0) = \arg \min_{\alpha} \phi(\alpha) = \alpha(\alpha - 2).$$

Annullando la derivata $\dot{\phi}(\alpha) = 2\alpha - 2 = 2(\alpha - 1) = 0$, si ottiene $\alpha^0 = 1$ e quindi

$$x^1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Iterazione 1. Verifica condizioni di arresto

$$\nabla f(x^1) = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} \neq 0$$

quindi il punto non è ottimo. La nuova direzione è

$$d^1 = -\nabla f(x^1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Determiniamo $\alpha^1 = \arg \min_{\alpha} f(x^1 + \alpha d^1) = \arg \min_{\alpha} (5\alpha^2 - 2\alpha - 1)$. Annullando la derivata

$$\dot{\phi}(\alpha) = 10\alpha - 2 = 0$$

si ottiene $\alpha^1 = \frac{1}{5}$. Quindi

$$\begin{aligned} x^2 &= x^1 + \alpha^1 \nabla f(x^1) = \\ &= \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/5 \\ 1/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 1.2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Iterazione 2. Verifica condizione di arresto

$$\nabla f(x^2) = \begin{bmatrix} 1/5 \\ -1/5 \end{bmatrix} \neq 0,$$

quindi il punto x^2 non è ottimo. Si calcola la direzione

$$d^2 = -\nabla f(x^2) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} -0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix}.$$

Determiniamo $\alpha^2 = \arg \min_{\alpha} f(x^2 + \alpha d^2) = \arg \min_{\alpha} (\alpha^2 - 2\alpha - 30)/25$. Annullando la derivata

$$\dot{\phi}(\alpha) = 2\alpha - 2 = 0$$

si ottiene $\alpha^2 = 1$. Quindi il punto $x^3 = x^2 + \alpha^2 d^2$ è

$$x^3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 7/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1,4 \end{bmatrix}.$$

Iterazione 3. Verifica condizione di arresto:

$$\nabla q(x^3) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} \\ -\frac{1}{5} \end{bmatrix} \neq 0$$

e il punto non è ottimo. Si dovrebbe proseguire.

Noi terminiamo qui l'applicazione dell'algoritmo. La rapidità di convergenza è determinata dal rapporto

$$\frac{\lambda_{\max}(Q)}{\lambda_{\min}(Q)} = \left(\frac{3 + \sqrt{5}}{3 - \sqrt{5}} \right).$$

□

Esercizio 13 Si consideri la funzione dell'esercizio 6. Si applichi il metodo del gradiente con ricerca di linea esatta a partire dal punto $x^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Nel caso di funzione quadratica si può garantire la convergenza del metodo del gradiente in un numero finito di iterazioni scegliendo il passo α^k in modo opportuno.

In particolare possiamo definire il metodo (**NON in PROGRAMMA**)

Metodo del gradiente con uso degli autovalori

Passo 1. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$, si calcolano gli autovalori di Q

$$\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n.$$

Do k=0, ..., n-1

Passo k2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo k3. Si pone

$$x^{k+1} = x^k - \frac{1}{\lambda_{k+1}} \nabla f(x^k), \quad (106)$$

End Do

Vale il seguente risultato che si riporta senza dimostrazione.

Teorema 42 Si consideri la funzione

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x,$$

con Q matrice simmetrica e definita positiva e siano $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ gli autovalori di Q . Il metodo del gradiente, descritto alla generica iterazione $k \geq 0$ dalla formula di aggiornamento (106), converge al massimo in n iterazioni all'unico punto stazionario $x^* = -Q^{-1}c$ di f .

Esempio 17 Sia dato il problema dell'Esercizio 16. Si scrivano le iterazioni del metodo del metodo del gradiente del tipo (106) a partire dal punto iniziale $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Soluzione. Abbiamo già calcolato gli autovalori di Q che sono $\lambda_1 = 3 - \sqrt{5}$ e $\lambda_2 = 3 + \sqrt{5}$. Quindi le iterazioni sono

Iterazione 1.

$$x^1 = x^0 - \frac{1}{\lambda_1} \nabla f(x^0)$$

$$x^1 = x^0 - \frac{1}{\lambda_1} \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3 - \sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{3 + \sqrt{5}}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Iterazione 2.

$$x^2 = x^1 - \frac{1}{\lambda_2} \nabla f(x^1) = \frac{3 + \sqrt{5}}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{3 + \sqrt{5}} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{5}+1}{2} \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

Il minimo è stato ottenuto in $n = 2$ iterazioni.

Osserviamo che possiamo scrivere:

$$x^2 = x^1 - \frac{1}{\lambda_2} \nabla f(x^1) = x^0 - \frac{1}{\lambda_1} \nabla f(x^0) - \frac{1}{\lambda_2} \nabla f(x^1)$$

Generalizzando al caso n dimensionale, per una funzione quadratica strettamente convessa possiamo scrivere analiticamente, l'espressione della soluzione ottima che è:

$$x^* = x^0 - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{\lambda_{j+1}} \nabla f(x^j).$$

□

Quindi utilizzando “maggior” informazioni, in particolare informazioni del secondo ordine (gli autovalori della matrice Q), si riesce ad ottenere una maggiore rapidità di convergenza finita. Vedremo nel paragrafo dedicato al metodo del gradiente coniugato che questo stesso tipo di convergenza si può ottenere utilizzando implicitamente informazioni del secondo ordine nella definizione della direzione di ricerca piuttosto che nella definizione del passo.

Esercizio 14 Si consideri la funzione dell'Esercizio 6. Mostrare che il metodo del gradiente definito dall'iterazione (106) produce le stesse iterazioni del metodo del gradiente con ricerca di linea esatta. Dare una giustificazione teorica.

Consideriamo ora il caso di funzioni non quadratiche.

10.5 Il metodo del gradiente con ricerca di linea

Nel caso di funzione non quadratica, abbiamo già osservato che effettuare una ricerca di linea esatta può essere troppo oneroso e non necessario.

Per il metodo del gradiente si può utilizzare una ricerca di linea di tipo Armijo come descritto nel paragrafo 10.2.3. In particolare definiamo il seguente schema generale di algoritmo del metodo del gradiente.

Metodo del gradiente con ricerca di linea di Armijo

Dati. $\gamma \in (0, 1/2)$ e $\delta \in (0, 1)$.

Passo 1. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$ e si pone $k = 0$.

Passo 2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo 3. Si sceglie $\alpha = \Delta^k$ e si calcola il più piccolo valore intero $j^* \in \{0, 1, 2, \dots\}$ tale che

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) - \gamma \alpha \delta^j \|\nabla f(x^k)\|^2,$$

con $x^{k+1} = x^k - \alpha \delta^j \nabla f(x^k)$.

Si pone $\alpha^k = \alpha \delta^{j^*}$.

Passo 4. Si assume

$$x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k),$$

$k = k + 1$ e si ritorna al passo 2.

Vale la seguente proposizione che assicura la convergenza globale del metodo del gradiente con una tecnica di ricerca unidimensionale tipo-Armijo.

Teorema 43 [3] *Supponiamo che valga l'Ipotesi 1. Sia $\{x^k\}$ la successione prodotta dal metodo del gradiente con una ricerca unidimensionale di tipo-Armijo.*

Allora, o esiste un indice $\nu \geq 0$ tale che $x^\nu \in \mathcal{L}_{x^0}$ e $\nabla f(x^\nu) = 0$, oppure viene prodotta una successione infinita tale che ogni punto di accumulazione \bar{x} di $\{x^k\}$ appartiene a \mathcal{L}_{x^0} e soddisfa $\nabla f(\bar{x}) = 0$.

Naturalmente le stesse conclusioni della Proposizione 43, valgono anche se il passo α è determinato con una ricerca di linea esatta.

Per quanto riguarda la rapidità di convergenza del metodo del gradiente nel caso di funzioni non quadratiche, si può ottenere una stima analoga a quella del Teorema 40 con riferimento al caso di funzione convessa e di ricerca di linea esatta.

Esempio 18 *Si consideri il problema dell'Esempio 11 del paragrafo 7.4. Si determini l'intervallo di valori di α accettabili secondo il criterio di Armijo alla prima iterazione del metodo del gradiente con punto iniziale $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, posto $\gamma = 1/4$.*

Soluzione. Abbiamo già calcolato il gradiente nell'esempio 14. La prima iterazione del metodo del gradiente parametrica nel passo α è

$$x^1(\alpha) = x^0 - \alpha \nabla f(x^0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ \alpha \end{pmatrix}$$

La regola di Armijo richiede che risulti

$$f(x^1(\alpha)) \leq f(x^0) - \gamma \alpha \|\nabla f(x^0)\|^2$$

Sostituendo i valori otteniamo la condizione:

$$-2\alpha + \alpha^2 \leq 0 - \frac{1}{4}\alpha^2 \quad \implies \quad \alpha^2 - \frac{3}{2}\alpha \leq 0$$

che è soddisfatto per valori di $\alpha \in (0, \frac{3}{2}]$. □

Esercizio 15 *Si consideri la funzione dell'Esercizio 6. Sia $x^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, si determini l'intervallo di valori di α accettabili secondo la ricerca di linea di Armijo alla prima iterazione del metodo del gradiente.*

10.6 Il metodo del gradiente coniugato

I *metodi delle direzioni coniugate* sono stati originariamente introdotti come metodi iterativi per la minimizzazione di funzioni quadratiche e sono stati successivamente estesi alla minimizzazione di funzioni non quadratiche.

Una delle caratteristiche principali dei metodi delle direzioni coniugate è che essi consentono di determinare in un numero finito di iterazioni il minimo di una funzione quadratica.

Abbiamo visto nel paragrafo precedente che un risultato analogo si può ottenere con il metodo del gradiente con una scelta opportuna del passo α che richiede il calcolo degli autovalori della matrice Q .

La motivazione alla base dell'uso dei metodi delle direzioni coniugate nell'ambito dell'ottimizzazione non vincolata sta nel fatto che tali metodi consentono di ottenere una rapidità di convergenza superiore rispetto a quella del metodo del gradiente, senza tuttavia richiedere *esplicitamente* la conoscenza della matrice Hessiana e senza far uso di operazioni matriciali complesse. Ciò li rende particolarmente vantaggiosi nella soluzione di problemi di ottimizzazione a grandi dimensioni.

Nel seguito analizzeremo dapprima i metodi delle direzioni coniugate con riferimento alla minimizzazione di funzioni quadratiche; successivamente considereremo l'estensione al caso non quadratico.

10.7 Il metodo delle direzioni coniugate per funzioni quadratiche

Consideriamo una funzione quadratica del tipo:

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x,$$

in cui Q è una matrice simmetrica definita positiva e $c \in R^n$, il cui unico punto di minimo è $x^* = -Q^{-1}c$.

Introduciamo la seguente definizione.

Definizione 8 *Assegnata una matrice Q simmetrica e definita positiva, due vettori non nulli $d^i, d^j \in R^n$ si dicono coniugati rispetto a Q (oppure Q -coniugati, oppure Q -ortogonali) se risulta:*

$$d^{iT} Q d^j = 0.$$

Si può dimostrare facilmente la seguente proprietà di vettori mutuamente coniugati.

Teorema 44 [3] *Siano $d^0, d^1, \dots, d^m \in R^n$ $m+1$ vettori non nulli e mutuamente coniugati rispetto a una matrice Q simmetrica definita positiva $n \times n$. Allora d^0, d^1, \dots, d^m sono linearmente indipendenti.*

Dimostrazione. Siano $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m$ costanti reali tali che

$$\sum_{j=0}^m \alpha_j d_j = 0. \quad (107)$$

Moltiplicando a sinistra per Q ed eseguendo il prodotto scalare per d_i si ottiene, essendo $d_i' Q d_j = 0$ per $i \neq j$:

$$0 = \sum_{j=0}^m \alpha_j d_i' Q d_j = \alpha_i d_i' Q d_i.$$

D'altra parte, poichè Q è definita positiva e $d_i \neq 0$ si ha $d_i' Q d_i > 0$ e quindi deve essere necessariamente $\alpha_i = 0$. Ripetendo lo stesso ragionamento per $i = 0, 1, \dots, m$ si può affermare che la (107) implica $\alpha_i = 0$ per $i = 0, 1, \dots, m$, il che prova l'indipendenza lineare dei vettori d_0, \dots, d_m . \square

Definiamo allora il metodo delle direzioni coniugate per la minimizzazione di una funzione quadratica strettamente convessa.

Metodo delle direzioni coniugate per funzioni quadratiche

Passo 1. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$, si calcolano n vettori non nulli $d^0, d^1, \dots, d^{n-1} \in R^n$ mutuamente coniugati rispetto a Q .

Do $k=0, \dots, n-1$

Passo k2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo k3. Si pone

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k,$$

con α^k ottenuto con una ricerca di linea esatta:

$$\alpha^k = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{d^{kT} Q d^k}.$$

End Do

Possiamo ora dimostrare la convergenza del metodo in un numero finito di passi.

Teorema 45 *Sia f una funzione quadratica del tipo $f(x) = \frac{1}{2}x^T Q x + c^T x$, con Q una matrice simmetrica definita positiva e siano*

$$d^0, d^1, \dots, d^{n-1}$$

n vettori non nulli e mutuamente coniugati rispetto a Q .

Sia $\{x^k\}$ la successione generata dal metodo delle direzioni coniugate. Allora esiste un intero $m \leq n$ tale che x^m coincide con il punto di minimo x^ di f .*

Dimostrazione. È sufficiente dimostrare che esiste $m \leq n$ tale che $\nabla f(x^m) = 0$; infatti, per la stretta convessità di f , questo implica che x^m è il punto di minimo di f .

Sia k un intero e supponiamo che risulti (altrimenti l'algoritmo si sarebbe fermato)

$$\nabla f(x^i) \neq 0, \text{ per } i = 0, 1, \dots, k-1.$$

Sia x^i un qualunque punto iniziale, l'iterazione x^k ottenuta a partire da x^i (con $k > i$) avrà la seguente espressione:

$$x^k = x^i + \sum_{j=i}^{k-1} \alpha^j d^j.$$

Premoltiplicando per Q si ottiene:

$$Qx^k = Qx^i + \sum_{j=i}^{k-1} \alpha^j Qd^j.$$

Poiché $\nabla f(x) = Qx + c$, dall'equazione precedente, aggiungendo a destra e sinistra c , si ha:

$$\nabla f(x^k) = \nabla f(x^i) + \sum_{j=i}^{k-1} \alpha^j Qd^j,$$

Moltiplicando ancora scalarmente per d^i si ha:

$$d^{iT} \nabla f(x^k) = d^{iT} \nabla f(x^i) + \sum_{j=i}^{k-1} \alpha^j d^{iT} Qd^j$$

Tenendo conto dell'ipotesi di coniugatezza delle direzioni per cui $d^{iT} Qd^j = 0$ per $i \neq j$, l'unico termine della sommatoria diverso da zero è quello corrispondente a $j = i$ e quindi si ha:

$$d^{iT} \nabla f(x^k) = d^{iT} \nabla f(x^i) + \alpha^i d^{iT} Qd^i.$$

Ricordando ora l'espressione di α_i si ottiene

$$d^{iT} \nabla f(x^k) = d^{iT} \nabla f(x^i) + \alpha^i d^{iT} Qd^i = d^{iT} \nabla f(x^i) - \frac{d^{iT} \nabla f(x^i)}{d^{iT} Qd^i} d^{iT} Qd^i = 0.$$

Poiché x^i è stato scelto in modo del tutto arbitrario, purché $k > i$ e $\nabla f(x^i) \neq 0$, si può scrivere:

$$\nabla f(x^k)^T d^i = 0 \quad \text{per ogni } i = 0, 1, \dots, k-1, \quad (108)$$

cioè il gradiente al passo k è ortogonale a tutte le direzioni coniugate usate fino al passo k .

Supponiamo allora che sia $\nabla f(x^i) \neq 0$, per $i = 0, 1, \dots, n-1$. Allora possiamo scrivere la relazione (108) per $k = n$ si ha

$$\nabla f(x^n)^T d^i = 0, \quad \text{per ogni } i = 0, 1, \dots, n-1$$

e quindi $\nabla f(x^n)$ è ortogonale agli n vettori d^0, \dots, d^{n-1} che, per la Proposizione 44 sono linearmente indipendenti, ciò implica che

$$\nabla f(x^n) = 0.$$

□

Esempio 19 Consideriamo nuovamente il problema dell'Esempio (16)

$$\min x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$$

Sia assegnato il vettore

$$d^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Determinare un vettore d^1 mutuamente coniugato con d^0 rispetto alla matrice hessiana

$$Q = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}.$$

Applicare il metodo delle direzioni coniugate con direzioni assegnate d^0, d^1 , a partire dal punto iniziale $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Soluzione. Dato il vettore $d^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$, generiamo un vettore d^1 coniugato cioè tale che $d^{0T}Qd^1 = 0$. Si ha:

$$(1 \quad -2) \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1^1 \\ d_2^1 \end{pmatrix} = (0 \quad -2) \begin{pmatrix} d_1^1 \\ d_2^1 \end{pmatrix} = -2d_2^1 = 0.$$

Quindi un qualunque vettore della forma

$$d^1 = \begin{pmatrix} d_1^1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

è Q coniugato con d^0 . Scegliamo, ad esempio,

$$d^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Applichiamo ora il metodo delle direzioni coniugate con direzioni assegnate d^0, d^1 .

Iterazione 1. Calcoliamo il passo α^0 che minimizza esattamente $f(x)$ lungo d^0 .

$$\alpha^0 = -\frac{\nabla f(x^0)^T d^0}{d^{0T} Q d^0} = \frac{(1 \quad -1) \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}}{(1 \quad -2) \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}} = -\frac{3}{4}$$

Quindi il nuovo punto $x^1 = x^0 + \alpha^0 d^0$ è

$$x^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3/4 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

Iterazione 2. Verifica condizione di arresto:

$$\nabla f(x^1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix} \neq 0$$

quindi il punto non é ottimo e si prosegue. Minimizzando in modo esatto lungo $d^{(1)}$ si ha:

$$\alpha^1 = -\frac{\nabla f(x^1)^T d^1}{d^{1T} Q d^1} = \frac{-(1 \quad -5/2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}{(1 \quad 0) \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} = -\frac{1}{4}$$

Il nuovo punto é quindi Determiniamo il punto $x^2 = x^1 + \alpha^1 d^1$ e si ottiene

$$x^2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 3/2 \end{pmatrix}$$

che é il punto ottimo. Infatti risulta

$$\nabla f(x^2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La soluzione ottima é ottenuta in $n = 2$ passi.

Osservazione 11 Notiamo che risulta $\alpha^0, \alpha^1 < 0$. Infatti abbiamo

$$\nabla f(x^0)^T d^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = 3 \quad \nabla f(x^1)^T d^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

cioè le direzioni d^0 e d^1 sono di salita.

□

Esercizio 16 Consideriamo il problema dell'Esempio (16). Applicare il metodo delle direzioni coniugate con direzioni assegnate $d^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$, $d^1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, a partire dal punto iniziale $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Esercizio 17 Si consideri la funzione dell'Esercizio 6. Si applichi il metodo delle direzioni coniugate con ricerca di linea esatta a partire dal punto $x^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e con una direzione assegnata $d^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}$.

10.8 Metodo del gradiente coniugato per funzioni quadratiche

Nella Proposizione 45 si è supposto che le direzioni d^0, d^1, \dots, d^{n-1} fossero direzioni coniugate assegnate. Il calcolo a priori di vettori mutuamente coniugati rispetto ad una matrice Q può essere però troppo oneroso e coinvolge operazioni complesse sulla matrice Q . In generale, quindi è interessante uno schema di algoritmo in cui i vettori Q -coniugati vengono generati iterativamente.

Questa classe di metodi è nota come *metodo del gradiente coniugato*. La prima direzione è quella dell'antigradiente $d^0 = -\nabla f(x^0)$ e le direzioni successive, tutte coniugate con d^0 e tra di loro, sono ottenute con una combinazione lineare della direzione

dell'antigradiente e della direzione ottenuta al passo precedente ovvero sono generate con la formula di aggiornamento

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta^k d^k; \quad (109)$$

la scelta di β^k assicura che la direzione d^{k+1} sia coniugata rispetto a d^k , ovvero si impone che $d^{kT} Q d^{k+1} = -d^{kT} Q \nabla f(x^{k+1}) + \beta^k d^{kT} Q d^k = 0$ da cui si ottiene l'espressione del β^k

$$\beta^k = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T Q d^k}{d^{kT} Q d^k}. \quad (110)$$

È possibile eliminare la presenza esplicita della matrice Q nella definizione di β^k ; a partire dalla formula di aggiornamento $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$, moltiplicando per Q e aggiungendo a destra e sinistra c , si ottiene $Qx^{k+1} + c = Qx^k + c + \alpha^k Qd^k$ ovvero, ricordando l'espressione del gradiente,

$$\nabla f(x^{k+1}) = \nabla f(x^k) + \alpha^k Qd^k$$

da cui si può ricavare

$$Qd^k = \frac{\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)}{\alpha^k}$$

Sostituendo nell'espressione di β^k e semplificando α^k , si ottiene:

$$\beta^k = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T (\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))}{d^{kT} (\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))} \quad (111)$$

Osserviamo che (110) e (111) sono equivalenti per funzioni quadratiche e indipendenti dalla definizione della direzione e del passo.

A partire da (111), si possono dare ulteriori diverse espressioni per il termine β^k . Ad esempio nel caso di uso di ricerca di linea esatta, vale la condizione $d^{kT} \nabla f(x^{k+1}) = 0$. Utilizzandola per esempio nella (111) si può scrivere:

$$\beta^k = -\frac{\nabla f(x^{k+1})^T (\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))}{d^{kT} \nabla f(x^k)}. \quad (112)$$

Inoltre dalla (109) moltiplicata per $\nabla f(x^{k+1})$ si ottiene (per qualunque k)

$$\nabla f(x^{k+1})^T d^{k+1} = -\|\nabla f(x^{k+1})\|^2 + \beta^k \nabla f(x^{k+1})^T d^k = -\|\nabla f(x^{k+1})\|^2.$$

Sostituendo nella (112) si ottiene una formula molto famosa detta di *Polak-Ribière*:

$$\beta^k = \frac{\nabla f(x^{k+1})^T (\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))}{\|\nabla f(x^k)\|^2}. \quad (113)$$

Sfruttando ulteriori proprietà nel caso quadratico, che non riportiamo, si ottiene la formula di *Fletcher-Reeves*

$$\beta^k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2}. \quad (114)$$

Riportiamo un possibile schema di metodo del gradiente coniugato.

Metodo del gradiente coniugato di Fletcher-Reeves

Passo 1. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$ e si pone

$$d^0 = -\nabla f(x^0) = -(Qx^0 + c) \quad (115)$$

Do k=0, ..., n-1

Passo k2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo k3. Si pone

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k,$$

con α^k ottenuto con una ricerca di linea esatta:

$$\alpha^k = -\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{d^{kT} Q d^k}.$$

Passo k4. Se $\nabla f(x^{k+1}) \neq 0$, definiamo d^{k+1} :

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta^k d^k,$$

in cui:

$$\beta^k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2}.$$

End Do

Si può dimostrare che l'algoritmo del gradiente coniugato genera direzioni coniugate e quindi determina in un numero finito di passi il punto di minimo della funzione quadratica f . In particolare vale il seguente risultato che si riporta senza dimostrazione.

Teorema 46 [3] *Sia f una funzione quadratica del tipo $f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x$, con Q una matrice simmetrica definita positiva e sia $\{x^k\}$ la successione generata dal metodo del gradiente coniugato. Allora le direzioni generate dal metodo del gradiente coniugato sono coniugate tra loro ed esiste un indice $m \leq n$ tale che x^m coincide con il punto di minimo x^* di f .*

Esempio 20 *Consideriamo il problema dell'esercizio 16*

$$\min x_1 - x_2 + 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 =$$

Applicare il metodo del gradiente coniugato a partire dal punto iniziale $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Soluzione. La prima iterazione è la stessa del metodo del gradiente vista nell'esempio 16. **Iterazione 1.** La direzione è

$$d^0 = -\nabla f(x^0) = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Con una ricerca di linea esatta si ottiene quindi

$$x^1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Iterazione 2. Verifica condizioni di arresto:

$$\nabla q(x^1) = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} \neq 0$$

quindi si prosegue.

Si calcola una nuova direzione mutuamente coniugata con d^0 ,

$$d^1 = -\nabla f(x^1) + \beta^0 d^0$$

$$\beta^0 = \frac{\|\nabla f(x^1)\|^2}{\|\nabla f(x^0)\|^2} = 1$$

$$d^{(1)} = -\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Calcoliamo il passo $\alpha^{(1)}$ secondo la formula esatta

$$\alpha^{(1)} = \frac{(1 \quad 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}}{(0 \quad 2) \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}} = \frac{1}{4}$$

che equivale a minimizzare la funzione $\phi(\alpha) = 4\alpha^2 - 2\alpha - 1$

Quindi si ottiene il nuovo punto $x^2 = x^1 + \alpha^1 d^1$ come

$$x^2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 3/2 \end{bmatrix} = x^*$$

La soluzione ottima è stata trovata in $n = 2$ passi.

10.9 Il metodo del gradiente coniugato nel caso non quadratico

Nel paragrafo precedente abbiamo ottenuto diverse formule equivalenti per lo scalare β^k . Tutte le formule sono state ottenute sfruttando alcune proprietà delle funzioni quadratiche e il fatto che la ricerca di linea fosse esatta. Nel caso di funzioni non quadratiche le proprietà utilizzate per derivare le diverse formule non sono più valide e, come conseguenza, le formule di β^k (110)(112)(114) non sono equivalenti tra loro, ma danno luogo a metodi diversi.

In particolare nelle (112) e (114) non compare esplicitamente la matrice hessiana Q e quindi possono essere utilizzate anche nel caso di funzioni non quadratiche.

Scegliamo di descrivere brevemente solo un possibile algoritmo basato sulla formula di Fletcher-Reeves.

Metodo del gradiente coniugato di Fletcher-Reeves

Passo 0. Si fissa un punto iniziale $x^0 \in R^n$ tale che $\nabla f(x^0) \neq 0$; si pone

$$d^0 = -\nabla f(x^0)$$

e $k = 0$.

Passo 2. Si calcola α^k con una ricerca unidimensionale e si pone

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k.$$

Passo 3. Se $\nabla f(x^{k+1}) \neq 0$, si pone d^{k+1} :

$$d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta^k d^k,$$

in cui:

$$\beta^k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2},$$

e si torna al passo 2.

Per definire completamente lo schema precedente è necessario specificare come deve essere fatta la ricerca unidimensionale per scelta di α^k . Osserviamo che nel punto x^{k+1} la direzione generata dal metodo potrebbe non essere di discesa. Infatti vale

$$\nabla f(x^{k+1})^T d^{k+1} = -\|\nabla f(x^{k+1})\|^2 + \beta^k \nabla f(x^{k+1})^T d^k.$$

Se la ricerca di linea è esatta, risulta $\nabla f(x^{k+1})^T d^k = 0$ e quindi la direzione d^{k+1} è effettivamente di discesa poiché risulta:

$$\nabla f(x^{k+1})^T d^{k+1} = -\|\nabla f(x^{k+1})\|^2 < 0$$

Nel caso di funzioni non lineari, però effettuare una ricerca di linea esatta non è computazionalmente accettabile e quindi in generale si utilizzano criteri di ricerca di linea inesatti per cui risulta $\nabla f(x^{k+1})^T d^k \neq 0$. La scelta del passo α^k deve quindi garantire almeno che $\nabla f(x^{k+1})^T d^{k+1} < 0$ cioè che

$$-\|\nabla f(x^{k+1})\|^2 + \beta^k \nabla f(x^{k+1})^T d^k < 0$$

che può essere assicurato rendendo sufficientemente piccolo il termine $\nabla f(x^{k+1})^T d^k$, cosicché il termine dominante sia $-\|\nabla f(x^{k+1})\|^2$. Questo condizione NON può essere assicurata usando solo una ricerca di linea di Armijo, ma richiede una ricerca di linea più elaborata (metodo di Wolfe [3]) che sarà oggetto di successivi corsi.

10.10 Il metodo di Newton

Sia $f : R^n \rightarrow R$ una funzione due volte continuamente differenziabile; il *metodo di Newton* per la minimizzazione di f consiste nel costruire una successione di punti minimizzando a ogni passo un'approssimazione quadratica della funzione.

Se x^k è un punto assegnato, si può scrivere:

$$f(x^k + s) = f(x^k) + \nabla f(x^k)'s + \frac{1}{2}s'\nabla^2 f(x^k)s + \beta(x^k, s),$$

in cui $\beta(x^k, s)/\|s\|^2 \rightarrow 0$ per $s \rightarrow 0$. Per valori sufficientemente piccoli di $\|s\|$ si può allora pensare di approssimare $f(x^k + s)$ con la funzione quadratica

$$q^k(s) = f(x^k) + \nabla f(x^k)'s + \frac{1}{2}s'\nabla^2 f(x^k)s$$

e determinare il punto successivo

$$x^{k+1} = x^k + s^k$$

scegliendo s^k in modo da minimizzare (ove possibile) la funzione $q^k(s)$ rispetto a s . Poiché

$$\nabla q^k(s) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)s,$$

se si suppone che $\nabla^2 f(x^k)$ sia definita positiva, il punto di minimo di $q^k(s)$ sarà dato da:

$$s^k = -[\nabla^2 f(x^k)]^{-1}\nabla f(x^k).$$

Il metodo di Newton è allora definito dall'iterazione

$$x^{k+1} = x^k - [\nabla^2 f(x^k)]^{-1}\nabla f(x^k). \quad (116)$$

Le proprietà di convergenza locale del metodo di Newton sono state oggetto di studi approfonditi. In quel che segue, tuttavia, ci limiteremo a caratterizzare le proprietà di convergenza locale in R^n assumendo come ipotesi l'esistenza di soluzioni.

Riportiamo, in particolare, il risultato seguente (per la dimostrazione si veda [3]).

Teorema 47 *Sia $f : R^n \rightarrow R$ una funzione due volte continuamente differenziabile su un insieme aperto $\mathcal{D} \subseteq R^n$.*

Supponiamo inoltre che valgano le condizioni seguenti:

- (i) *esiste un $x^* \in \mathcal{D}$ tale che $\nabla f(x^*) = 0$;*
- (ii) *la matrice hessiana $\nabla^2 f(x^*)$ è non singolare;*
- (iii) *esiste una costante $L > 0$ tale che, per ogni $x, y \in \mathcal{D}$, si abbia*

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x - y\|.$$

Allora esiste una sfera aperta $\mathcal{B}(x^; \varepsilon) \subset \mathcal{D}$, tale che, se $x^0 \in \mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$, la successione $\{x^k\}$ generata dal metodo di Newton (116) rimane in $\mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$ e converge a x^* con rapidità di convergenza quadratica.*

Si può osservare che il risultato precedente caratterizza la convergenza locale del metodo di Newton nell'intorno di un qualsiasi *punto stazionario* in cui la matrice Hessiana sia non singolare; si può trattare quindi, in particolare, sia di un minimo che di un massimo locale.

10.11 Il metodo di Newton con ricerca di linea

Nell'applicazione del metodo di Newton alla minimizzazione non vincolata occorre tener conto dei problemi seguenti:

- (i) la direzione di Newton può non essere definita in x^k ($\nabla^2 f(x^k)$ è singolare);
- (ii) la successione prodotta dal metodo di Newton può non essere convergente;
- (iii) si può avere convergenza verso massimi locali.

Per superare tali difficoltà si rende necessario modificare, con opportuni criteri, la direzione di ricerca e introdurre eventualmente anche un parametro scalare da definire attraverso tecniche di ricerca unidimensionale. Le modifiche devono tuttavia essere tali da non far perdere le caratteristiche di rapidità di convergenza proprie del metodo di Newton.

Uno dei criteri più semplici per realizzare una modifica globalmente convergente del metodo di Newton può consistere, ad esempio, nell'utilizzare la direzione dell'antigradiente (o, più in generale, un'opportuna direzione di discesa) quando la direzione di Newton non soddisfa una condizione di sufficiente discesa e nello scegliere α^k con una tecnica di ricerca unidimensionale tipo-Armijo.

Ad esempio di modifica globalmente convergente del metodo di Newton consideriamo l'algoritmo seguente.

Metodo di Newton modificato

Dati. $\gamma \in (0, 1/2), \delta \in (0, 1),$.

Passo 1. Si sceglie $x_0 \in R^n$ e si pone $k = 0$.

Passo 2. Si calcola $\nabla f(x^k)$; se $\nabla f(x^k) = 0$ stop.

Passo 3. Si calcola $\nabla^2 f(x^k)$. Se esiste una soluzione s_N del sistema lineare:

$$\nabla^2 f(x^k)s = -\nabla f(x^k)$$

e la direzione soddisfa un'opportuna condizione di sufficiente discesa, si pone $d^k = s_N$, altrimenti si pone $d^k = -\nabla f(x^k)$.

Passo 4. Si sceglie α^k con ricerca di linea di Armijo (se la direzione $d^k = s_N$, si può porre $\Delta^k = 1$).

Passo 5. Si pone $x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k$, $k = k + 1$ e si va al passo 2.

Esempio 21 Sia dato il problema

$$\min -x_1^4 + 2x_1^2 + x_2^2$$

$$\text{Sia } x^0 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

1. Si scriva la prima iterazione del metodo di Newton puro;

2. Dire se il passo $\alpha = 1$ soddisfa una line search di tipo Armijo utilizzando la direzione di Newton calcolata al passo precedente.

Soluzione.

(i) Scriviamo gradiente ed hessiano della funzione obiettivo

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -4x_1^3 + 4x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} -12x_1^2 + 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

La prima iterazione del metodo di Newton puro è:

$$x^1 = x^0 - [\nabla^2 f(x^0)]^{-1} \nabla f(x^0).$$

Calcoliamo i valori di ∇f e $\nabla^2 f$ nel punto x^0

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Otteniamo quindi:

$$x^1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(ii) Osserviamo preliminarmente che la direzione di Newton ottenuta al passo precedente

$$s_N^0 = - \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

è di discesa nel punto x^0 . Infatti risulta $\nabla f(x^0)^T s_N^0 = -11/4 < 0$ (alla stessa conclusione si poteva arrivare osservando che $\nabla^2 f(x^0) \succ 0$). Posto

$$x^1(\alpha) = x^0 + \alpha s_N^0 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 - \alpha 3/2 \\ 1/2 - \alpha 1/2 \end{pmatrix}$$

dobbiamo verificare se è soddisfatta la condizione

$$f(x^1) \leq f(x^0) + \gamma \alpha \nabla f(x^0)^T s_N^0$$

con $\alpha = 1$. Si ottiene

$$x^1(\alpha) = \begin{pmatrix} 1/2 - 3/2 \\ 1/2 - 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

e quindi $f(x^1) = 1$, $f(x^0) = 11/16$. Quindi dobbiamo verificare se risulta

$$1 \leq \frac{11}{16} - \gamma \frac{11}{4}$$

che non è mai soddisfatta qualunque sia il valore di $\gamma > 0$.

□

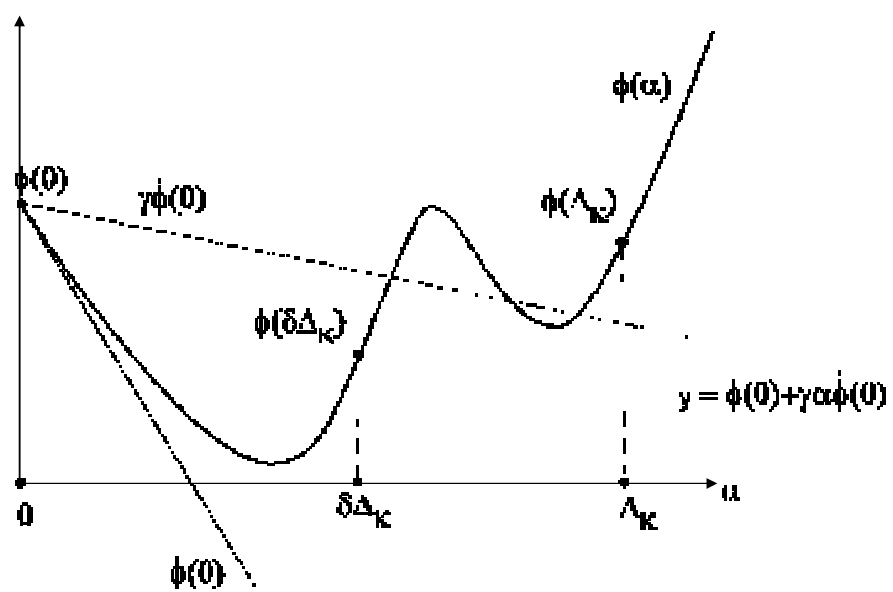


Figure 14: Visione geometrica della condizione di Armijo.

5

Cenni sul metodo di Newton

5.1 Generalità

Sia $f : R^n \rightarrow R$ una funzione due volte continuamente differenziabile; il *metodo di Newton* per la minimizzazione di f consiste nel costruire una successione di punti minimizzando a ogni passo un' *approssimazione quadratica* della funzione. Se x_k è un punto assegnato, si può scrivere:

$$f(x_k + s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)'s + \frac{1}{2}s'\nabla^2 f(x_k)s + \beta(x_k, s),$$

in cui $\beta(x_k, s)/\|s\|^2 \rightarrow 0$ per $s \rightarrow 0$. Per valori sufficientemente piccoli di $\|s\|$ si può allora pensare di approssimare $f(x_k + s)$ con la funzione quadratica

$$q_k(s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)'s + \frac{1}{2}s'\nabla^2 f(x_k)s$$

e determinare il punto successivo

$$x_{k+1} = x_k + s_k$$

scegliendo s_k in modo da minimizzare (ove possibile) la funzione $q_k(s)$ rispetto a s . Poiché

$$\nabla q_k(s) = \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k)s,$$

se si suppone che $\nabla^2 f(x_k)$ sia definita positiva, il punto di minimo di $q_k(s)$ sarà dato da:

$$s_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k).$$

Il metodo di Newton è allora definito dall'iterazione

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1}\nabla f(x_k). \quad (5.1)$$

Un modo equivalente di introdurre il metodo di Newton nella minimizzazione non vincolata è quello di interpretarlo come un algoritmo per la risoluzione del sistema di n equazioni in n incognite $\nabla f(x) = 0$, ottenute imponendo che il gradiente si annulli.

Consideriamo, più in generale, un sistema di n equazioni in n incognite

$$F(x) = 0,$$

in cui $F : R^n \rightarrow R^n$ si assume continuamente differenziabile e indichiamo con $J(x)$ la matrice Jacobiana di F , ossia:

$$J(x) = \left(\frac{\partial F_i(x)}{\partial x_j} \right), \quad i, j = 1, \dots, n,$$

in cui $F_i(x)$ sono le componenti del vettore $F(x)$. Assegnato $x_k \in R^n$, si può scrivere:

$$F(x_k + s) = F(x_k) + J(x_k)s + \gamma(x_k, s)$$

dove $\gamma(x_k, s)/\|s\| \rightarrow 0$ per $s \rightarrow 0$.

Si può allora determinare $x_{k+1} = x_k + s_k$ scegliendo s_k in modo da annullare l'approssimazione lineare di $F(x_k + s)$, ossia imponendo:

$$F(x_k) + J(x_k)s_k = 0.$$

Se $J(x_k)$ è invertibile, si ottiene:

$$s_k = -[J(x_k)]^{-1}F(x_k),$$

e quindi il metodo di Newton per la soluzione del sistema $F(x) = 0$ diviene:

$$x_{k+1} = x_k - [J(x_k)]^{-1}F(x_k) \quad (5.2)$$

È facile rendersi conto che, se si identifica $F(x)$ con il gradiente $\nabla f(x)$ di una funzione $f : R^n \rightarrow R$, la matrice Jacobiana di F coincide con la matrice Hessiana di f e quindi la (5.2) coincide con la (5.1).

Nel seguito riportiamo dapprima alcuni risultati fondamentali sulla *convergenza locale* del metodo di Newton, riferendoci, per semplicità di notazioni, al caso di un sistema di equazioni non lineari $F(x) = 0$. Successivamente, con riferimento ai problemi di minimizzazione non vincolata, accenneremo ad alcuni dei metodi proposti per assicurare la convergenza globale del metodo di Newton.

5.2 Convergenza locale

Le proprietà di convergenza locale del metodo di Newton per la soluzione di sistemi di equazioni non lineari sono state oggetto di studi approfonditi.

In particolare, uno dei risultati più importanti sull'argomento, noto anche come *teorema di Newton-Kantorovich*,¹ stabilisce condizioni sufficienti che assicurano l'esistenza di soluzioni dell'equazione $F(x) = 0$ su spazi di funzioni e fornisce una stima della regione di convergenza.

In quel che segue, tuttavia, ci limiteremo a caratterizzare le proprietà di convergenza locale in R^n assumendo come ipotesi l'esistenza di soluzioni. Ciò consente di semplificare notevolmente lo studio della convergenza; d'altra parte l'esistenza di punti stazionari nei problemi di minimizzazione non vincolata viene usualmente dedotta sulla base delle ipotesi che assicurano l'esistenza di un punto di minimo e delle condizioni di ottimalità.

Stabiliamo, in particolare, il risultato seguente.

Proposizione 5.1 *Sia $F : R^n \rightarrow R^n$ una funzione continuamente differenziabile su un insieme aperto $\mathcal{D} \subseteq R^n$.*

Supponiamo inoltre che valgano le condizioni seguenti:

- (i) *esiste un $x^* \in \mathcal{D}$ tale che $F(x^*) = 0$;*
- (ii) *la matrice Jacobiana $J(x^*)$ è non singolare;*
- (iii) *esiste una costante $L > 0$ tale che, per ogni $x, y \in \mathcal{D}$, si abbia*

$$\|J(x) - J(y)\| \leq L\|x - y\|.$$

Allora esiste una sfera aperta $\mathcal{B}(x^; \varepsilon) \subset \mathcal{D}$, tale che, se $x_0 \in \mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$, la successione $\{x_k\}$ generata dal metodo di Newton (5.2) rimane in $\mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$ e converge a x^* con rapidità di convergenza quadratica.*

Dim. Poiché $J(x^*)$ è non singolare e $J(x)$ è continua su \mathcal{D} , è possibile trovare un $\varepsilon_1 > 0$ e un $\mu > 0$ tali che $\mathcal{B}(x^*; \varepsilon_1) \subseteq \mathcal{D}$ e che, per ogni $x \in \mathcal{B}(x^*; \varepsilon_1)$ risulti:

$$\|J(x)^{-1}\| \leq \mu.$$

Sia ora

$$\varepsilon < \min [\varepsilon_1, 1/\mu L]$$

e supponiamo che sia $x_k \in \mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$.

¹cfr. Kantorovich, L. and Akilov, G. *Functional Analysis in Normed Spaces*, Pergamon Press, Oxford, 1964.

Essendo per ipotesi $F(x^*) = 0$, possiamo riscrivere la (5.2) nella forma:

$$x_{k+1} - x^* = -J(x_k)^{-1}[-J(x_k)(x_k - x^*) + F(x_k) - F(x^*)],$$

da cui segue:

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x^*\| &\leq \|J(x_k)^{-1}\| \|-J(x_k)(x_k - x^*) + F(x_k) - F(x^*)\| \\ &\leq \mu \|-J(x_k)(x_k - x^*) + F(x_k) - F(x^*)\|. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Poiché F è differenziabile, si ha:

$$F(x_k) - F(x^*) = \int_0^1 J(x^* + \lambda(x_k - x^*))(x_k - x^*)d\lambda,$$

e quindi, per la (5.3) si può scrivere:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \mu \left\| \int_0^1 [J(x^* + \lambda(x_k - x^*)) - J(x_k)](x_k - x^*)d\lambda \right\|.$$

Dalla disuguaglianza precedente si ottiene:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \mu \int_0^1 \|J(x^* + \lambda(x_k - x^*)) - J(x_k)\| d\lambda \|x_k - x^*\|$$

e quindi, tenendo conto dell'ipotesi (iii) si ha:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \mu L \|x_k - x^*\|^2. \quad (5.4)$$

Poiché si è assunto $x_k \in \mathcal{B}(x^*, \varepsilon)$ e si è scelto $\varepsilon < 1/\mu L$, dalla (5.4) segue

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \mu L \|x_k - x^*\|^2 \leq \mu L \varepsilon \|x_k - x^*\| < \|x_k - x^*\|. \quad (5.5)$$

Ciò implica $x_{k+1} \in \mathcal{B}(x^*, \varepsilon)$ e di conseguenza, per induzione, si ha $x_k \in \mathcal{B}(x^*, \varepsilon)$ per ogni k .

Applicando ripetutamente la (5.5) si ha anche:

$$\|x_k - x^*\| \leq (\mu L \varepsilon)^k \|x_0 - x^*\|,$$

da cui segue, essendo $\mu L \varepsilon < 1$, che $x_k \rightarrow x^*$. La (5.4) implica allora che la rapidità di convergenza è quadratica. \square

Il risultato espresso dalla proposizione precedente si può facilmente riportare a un risultato sulla convergenza del metodo di Newton nella minimizzazione di una funzione $f : R^n \rightarrow R$; basta infatti tener presente che le ipotesi su F e J si traducono in ipotesi su ∇f e $\nabla^2 f$.

In particolare, si può enunciare la proposizione seguente, che è una diretta conseguenza dalla Proposizione 5.1

Proposizione 5.2 Sia $f : R^n \rightarrow R$ una funzione due volte continuamente differenziabile su un insieme aperto $\mathcal{D} \subseteq R^n$. Supponiamo inoltre che valgano le condizioni seguenti:

- (i) esiste un $x^* \in \mathcal{D}$ tale che $\nabla f(x^*) = 0$;
- (ii) la matrice Hessiana $\nabla^2 f(x^*)$ è non singolare;
- (iii) esiste una costante $L > 0$ tale che, per ogni $x, y \in \mathcal{D}$, si abbia

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq L\|x - y\|.$$

Allora esiste una sfera aperta $\mathcal{B}(x^*; \varepsilon) \subset \mathcal{D}$, tale che, se $x_0 \in \mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$, la successione $\{x_k\}$ generata dal metodo di Newton (5.1) rimane in $\mathcal{B}(x^*; \varepsilon)$ e converge a x^* con rapidità di convergenza quadratica. \square

Si può osservare che il risultato precedente caratterizza la convergenza locale del metodo di Newton nell'intorno di un qualsiasi *punto stazionario* in cui la matrice Hessiana sia non singolare; si può trattare quindi, in particolare, sia di un minimo che di un massimo locale.

5.3 Cenni sulle modifiche globalmente convergenti del metodo di Newton

Nell'applicazione del metodo di Newton alla minimizzazione non vincolata occorre tener conto dei problemi seguenti:

- (i) la direzione di Newton può non essere definita in x_k in quanto $\nabla^2 f(x_k)$ è singolare;
- (ii) la successione prodotta dal metodo di Newton può non essere convergente;
- (iii) si può avere convergenza verso massimi locali.

Per superare tali difficoltà si rende necessario modificare, con opportuni criteri, la direzione di ricerca e introdurre eventualmente anche un parametro scalare da definire attraverso tecniche di ricerca unidimensionale. Le modifiche devono tuttavia essere tali da non far perdere le caratteristiche di rapidità di convergenza proprie del metodo di Newton. Per precisare meglio il problema introduciamo la seguente definizione.

Definizione 5.1 Sia $f : R^n \rightarrow R$ due volte continuamente differenziabile e supponiamo che l'insieme di livello $\mathcal{L}_0 = \{x \in R^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ sia compatto. Diremo che l'algoritmo definito dall'iterazione:

$$x_{k+1} = x_k + s_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

(con $s_k = 0$ se e solo se $\nabla f(x_k) = 0$), è una modifica globalmente convergente del metodo di Newton se valgono le seguenti proprietà:

- (i) se $\{x_k\}$ è infinita ogni punto di accumulazione di $\{x_k\}$ è un punto stazionario di f appartenente a \mathcal{L}_0 ;
- (ii) nessun punto di accumulazione di $\{x_k\}$ è un punto di massimo locale di f ;
- (iii) se $\{x_k\}$ converge a un punto di minimo locale x^* di f e $\nabla^2 f(x)$ soddisfa le ipotesi della *Proposizione 5.2*, esiste un k^* tale che, per ogni $k \geq k^*$ si abbia: $s_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$. \square

Tutte le modifiche globalmente convergenti del metodo di Newton finora proposte si possono ricondurre a uno schema iterativo del tipo:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k [\beta_k \nabla^2 f(x_k) + D_k]^{-1} \nabla f(x_k),$$

in cui α_k e β_k sono numeri reali tali che $\alpha_k > 0$, $\beta_k \geq 0$ e D_k è una matrice simmetrica definita positiva (in genere diagonale).

I valori dei parametri α_k e β_k e la matrice D_k devono essere scelti, a ogni k , in modo da soddisfare le condizioni della *Definizione 5.1*. In particolare, se $\beta_k = 0$ e $D_k = I$ si ottiene la direzione dell'antigradiente, mentre, per $\beta_k = 1$ e $D_k = 0$ si ottiene la direzione di Newton.

Uno dei criteri più semplici per realizzare una modifica globalmente convergente del metodo di Newton può consistere, ad esempio, nell'utilizzare la direzione dell'antigradiente quando la direzione di Newton non soddisfa una condizione d'angolo opportuna e nello scegliere α_k con una tecnica di ricerca unidimensionale tipo-Armijio.

Prima di illustrare un esempio di algoritmo, premettiamo, senza dimostrazione, il seguente risultato in cui si forniscono condizioni sotto cui il passo $\alpha = 1$ è accettabile in un algoritmo tipo-Armijio.

Proposizione 5.3 Sia $f : R^n \rightarrow R$ una funzione due volte continuamente differenziabile e siano $\{x_k\}$ e $\{d_k\}$ due successioni tali che valgano le condizioni seguenti:

- (i) $\{x_k\}$ converge a un punto x^* in cui $\nabla f(x^*) = 0$ e $\nabla^2 f(x^*)$ è definita positiva;
- (ii) esistono un indice \hat{k} e un numero $\rho > 0$ tali che, per ogni $k \geq \hat{k}$, risulti:

$$\nabla f(x_k)' d_k \leq -\rho \|d_k\|^2; \quad (5.6)$$

- (iii) vale il limite:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_k + d_k - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0. \quad (5.7)$$

Allora, per ogni $\gamma < 1/2$ assegnato, esiste un indice k^* , tale che, per ogni $k \geq k^*$ si ha:

$$f(x_k + d_k) \leq f(x_k) + \gamma \nabla f(x_k)' d_k. \quad \square$$

Come esempio di modifica globalmente convergente del metodo di Newton consideriamo l'algoritmo seguente.

Metodo di Newton modificato (MNM)

Dati: $q \geq 3, p \geq 2, c_1 > 0, c_2 > 0, c_3 > 0$.

Passo 1: Si sceglie $x_0 \in R^n$ e si pone $k = 0$.

Passo 2: Si calcola $\nabla f(x_k)$; se $\nabla f(x_k) = 0$ stop: altrimenti si calcola $\nabla^2 f(x_k)$.

Passo 3: Se il sistema lineare: $\nabla^2 f(x_k) s = -\nabla f(x_k)$ non ha soluzioni si pone $d_k = -\nabla f(x_k)$ e si va al passo 6: altrimenti si calcola una soluzione s_N .

Passo 4: Se $|\nabla f(x_k)' s_N| < c_2 \|\nabla f(x_k)\|^q$ oppure $\|s_N\|^p > c_3 \|\nabla f(x_k)\|$ si pone $d_k = -\nabla f(x_k)$ e si va al passo 6.

Passo 5: Se $\nabla f(x_k)' s_N < 0$ si assume $d_k = s_N$ e si va al passo 6; altrimenti si assume $d_k = -s_N$.

Passo 6: Si effettua una ricerca unidimensionale con il metodo di Armijo, con $\gamma < 1/2$ (assumendo come stima iniziale $\Delta_k = 1$ se la direzione di Newton s_N non è stata modificata). Si pone $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, k = k + 1$ e si va al passo 2. \square

È facile verificare che le direzioni calcolate per mezzo dell'algoritmo precedente o coincidono con la direzione dell'antigradiente oppure soddisfano le condizioni

$$\nabla f(x_k)'d_k \leq -c_2 \|\nabla f(x_k)\|^q, \quad \|d_k\|^p \leq c_3 \|\nabla f(x_k)\|, \leq \tilde{c}_3 \text{ per le } \text{condizioni}$$

il che assicura che l'algoritmo di Armijo con passo iniziale unitario sia convergente e che siano soddisfatte le condizioni sufficienti di convergenza globale considerate nel Capitolo 2.

Osservazione La scelta $d_k = -s_N$ effettuata al passo 5 se $\nabla f(x_k)'s > 0$, è motivata dal fatto che la direzione $d_k = -s_N$, oltre ad essere una direzione di discesa, è anche una *direzione a curvatura negativa*. Infatti, si ha, nelle ipotesi poste:

$$d_k' \nabla^2 f(x_k) d_k = \nabla f(x_k)' [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) < 0.$$

Una direzione a curvatura negativa può essere particolarmente vantaggiosa in quanto è presumibile che, riducendosi lungo di essa la derivata direzionale, si possa ottenere una notevole riduzione della funzione obiettivo.

In alternativa, si potrebbe anche assumere $d_k = -\nabla f(x_k)$ quando $\nabla f(x_k)'s_N > 0$. \square

Si può dimostrare il risultato seguente.

Proposizione 5.4 Sia $f : R^n \rightarrow R$ due volte continuamente differenziabile e si supponga che l'insieme di livello L_0 sia compatto. Allora l'algoritmo (MNM) è una modifica globalmente convergente del metodo di Newton nel senso della definizione 5.1. \square

L'algoritmo precedente è basato sull'uso della direzione dell'antigradiente nei punti in cui la direzione di Newton non è definita o non soddisfa opportune condizioni. Un criterio diverso per realizzare una modifica globalmente convergente del metodo di Newton può essere quello di sommare alla matrice Hessiana un'opportuna matrice definita positiva D_k in modo tale che la matrice $\nabla^2 f(x_k) + D_k$ risulti definita positiva. In tal caso si può assumere come direzione di ricerca la direzione

$$d_k = - [\nabla^2 f(x_k) + D_k]^{-1} \nabla f(x_k),$$

ed effettuare lungo d_k una ricerca unidimensionale.

Un metodo conveniente per determinare D_k è quello di utilizzare un *procedimento di fattorizzazione* mediante il quale vengono definite una matrice *diagonale* D_k e una matrice *triangolare inferiore* L_k con elementi diagonali positivi l_{ii} , tali che:

$$\nabla^2 f(x_k) + D_k = L_k L_k'.$$

Ciò assicura che la matrice $\nabla^2 f(x_k) + D_k$ sia definita positiva. È da notare inoltre che, disponendo della fattorizzazione $L_k L_k'$ è immediato risolvere il sistema lineare che fornisce d_k . Basta infatti determinare la soluzione s del sistema triangolare $L_k s = -\nabla f(x_k)$ e successivamente ricavare d_k risolvendo il sistema (anch'esso triangolare) $L_k' d_k = s$.

Sono stati sviluppati procedimenti di fattorizzazione in cui la determinazione di L_k viene effettuata alterando il meno possibile la matrice Hessiana (ossia scegliendo gli elementi di D_k abbastanza piccoli) e in modo da soddisfare anche le condizioni della Definizione 5.1. Una descrizione semplificata di un procedimento di questo tipo è riportata nel paragrafo 5.5.

Un diverso punto di vista nella definizione di modifiche globalmente convergenti del metodo di Newton è quello noto come metodo della "regione di confidenza" (*trust region*) che è stato oggetto di un'intensa attività di ricerca. Esso si basa sulla determinazione della direzione e dell'ampiezza dello spostamento da effettuare a partire da x_k in modo da minimizzare l'approssimazione quadratica di f in una regione sferica di centro x_k . Si parla perciò anche di *metodo a passo ristretto* (*restricted step*).

Per illustrare le motivazioni di questa impostazione, ricordiamo che il metodo di Newton per la minimizzazione non vincolata può essere interpretato come una sequenza di minimizzazioni dell'approssimazione quadratica $q_k(s)$ di f definita da:

$$q_k(s) = f(x_k) + \nabla f(x_k)'s + \frac{1}{2}s'\nabla^2 f(x_k)s.$$

È tuttavia evidente che, se $\nabla^2 f(x_k)$ non è almeno semidefinita positiva, la funzione $q_k(s)$ non ammette minimo. In tal caso, invece di fornire un diverso criterio per il calcolo della direzione, si può pensare di effettuare la minimizzazione di $q_k(s)$ in un intorno limitato di x_k , ossia per $\|s\| \leq a_k$, assumendo:

$$x_{k+1} = x_k + s_k,$$

dove $s_k \in R^n$ è la soluzione del problema

$$\min_{\|s\| \leq a_k} q_k(s)$$

Negli algoritmi finora proposti il raggio a_k che definisce la regione sferica attorno a x_k viene determinato in modo da assicurare che sia $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ e che la riduzione di f sia prossima a quella che si dovrebbe ottenere se $f(x_k + s)$ fosse effettivamente una funzione quadratica. Ciò quindi corrisponde a definire la regione attorno a x_k come la regione in cui si può ritenere ragionevolmente valida l'approssimazione quadratica. Di qui il nome di metodo della "regione di confidenza".

7

Metodi Quasi-Newton

7.1 Generalità

I *metodi Quasi-Newton* (noti anche come *metodi tipo-secante* o *metodi a metrica variabile*) costituiscono una classe di metodi per la minimizzazione non vincolata che richiedono soltanto la conoscenza delle derivate prime. I metodi Quasi-Newton forniscono una "approssimazione" del metodo di Newton che conserva (sotto appropriate ipotesi) una rapidità di convergenza superlineare, pur non richiedendo che venga prodotta un'approssimazione *consistente* della matrice Hessiana.

Come si è già visto, il metodo di Newton per la minimizzazione non vincolata si può descrivere per mezzo dell'iterazione

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k).$$

I metodi Quasi-Newton si possono descrivere per mezzo di un algoritmo del tipo

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k B_k^{-1} \nabla f(x_k),$$

in cui B_k è una matrice opportuna, aggiornata iterativamente, che approssima (in un senso da specificare) la matrice Hessiana ed α_k definisce lo spostamento lungo la direzione di ricerca. Se la funzione da minimizzare è una funzione quadratica del tipo:

$$f(x) = \frac{1}{2} x' Q x + c' x,$$

in cui Q è una matrice simmetrica, si ha

$$\nabla f(x) = Qx + c,$$

e di conseguenza, assegnati due punti x ed y qualsiasi, si può scrivere

$$\nabla f(y) - \nabla f(x) = Q(y - x),$$

o, equivalentemente:

$$Q^{-1}(\nabla f(y) - \nabla f(x)) = y - x.$$

Si può allora pensare, nel caso generale, di determinare la matrice B_{k+1} in modo da soddisfare la condizione (nota come *equazione Quasi-Newton*)

$$\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k) = B_{k+1}(x_{k+1} - x_k). \quad (7.1)$$

Ciò assicura che venga preservata una proprietà di cui godrebbe la matrice Hessiana ove la funzione da minimizzare fosse effettivamente quadratica. Ponendo, per semplicità:

$$\begin{aligned} \delta_k &= x_{k+1} - x_k \\ \gamma_k &= \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k), \end{aligned}$$

si può definire B_{k+1} aggiornando B_k in modo che risulti:

$$B_{k+1} = B_k + \Delta B_k, \quad \text{con } \gamma_k = (B_k + \Delta B_k) \delta_k. \quad (7.2)$$

In modo sostanzialmente equivalente, si può anche far riferimento, in luogo che alla (7.1) all'equazione quasi-Newton scritta nella forma:

$$H_{k+1}(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)) = x_{k+1} - x_k, \quad (7.3)$$

in cui ora H_{k+1} è pensata come un'approssimazione dell'Hessiana inversa. In tal caso l'iterazione di un metodo Quasi-Newton è definita da

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k H_k \nabla f(x_k),$$

e la matrice H_{k+1} è ottenuta imponendo

$$H_{k+1} = H_k + \Delta H_k, \quad \text{con } (H_k + \Delta H_k) \gamma_k = \delta_k. \quad (7.4)$$

I vari metodi Quasi-Newton finora proposti differiscono fra loro essenzialmente per la formule usate nella definizione della matrici di aggiornamento ΔB_k o ΔH_k che compaiono nella (7.2) o nella (7.3). Diremo nel seguito *formule dirette* le formule di aggiornamento relative a ΔB_k e *formule inverse* quelle relative a ΔH_k . È da notare che, se ci si riferisce alle formule dirette, una volta calcolata la matrice B_{k+1} , è necessario effettuare il calcolo dell'inversa, mentre le formule inverse forniscono direttamente la matrice che definisce la direzione di ricerca.

I metodi Quasi-Newton si possono anche riferire alla soluzione di un sistema di equazioni non lineari $F(x) = 0$, in cui $F : R^n \rightarrow R^n$. In tal caso, uno schema Quasi-Newton si può descrivere per mezzo dell'iterazione

$$x_{k+1} = x_k - B_k^{-1}F(x_k), \quad (7.5)$$

o, equivalentemente:

$$x_{k+1} = x_k - H_k F(x_k) \quad (7.6)$$

dove B_k e H_k sono approssimazioni, rispettivamente, di $J(x_k)$ e di $J(x_k)^{-1}$, essendo $J(x)$ la matrice Jacobiana definita da:

$$J(x) = \left(\frac{\partial F_i(x)}{\partial x_j} \right)_{i,j=1,\dots,n}$$

Le equazioni precedenti consentono di interpretare i metodi Quasi-Newton come una particolare generalizzazione n -dimensionale del metodo della secante. Infatti, assegnata l'equazione scalare $g(x) = 0$, con $x \in R$ e $g : R \rightarrow R$, il metodo della secante si può descrivere (supponendo di aver già generato i punti x_k e x_{k+1}), ponendo:

$$x_{k+2} = x_{k+1} - h_{k+1}g(x_{k+1}),$$

in cui:

$$h_{k+1} = \frac{x_{k+1} - x_k}{g(x_{k+1}) - g(x_k)}.$$

Si ottiene quindi

$$h_{k+1}(g(x_{k+1}) - g(x_k)) = x_{k+1} - x_k,$$

che è un'equazione formalmente analoga all'equazione quasi Newton (7.3), ove si identifichi ∇f con g .

Un'ulteriore interpretazione di alcuni metodi Quasi-Newton si può derivare con riferimento al metodo della discesa più ripida. Infatti, se si suppone che B_k sia una matrice simmetrica definita positiva e si definisce la norma non-euclidea:

$$\|x\|_{B_k} = [x' B_k x]^{1/2}, \quad (7.7)$$

la direzione che minimizza la derivata direzionale, tra quelle di lunghezza unitaria nella norma fissata, è data da:

$$d_k = - \frac{B_k^{-1} \nabla f(x_k)}{[\nabla f(x_k)' B_k^{-1} \nabla f(x_k)]^{1/2}}.$$

Ne segue che il metodo della discesa più ripida, relativamente alla metrica definita dalla (7.7), assume la forma $x_{k+1} = x_k - \alpha_k B_k^{-1} \nabla f(x_k)$. Per tale motivo, tenendo conto del fatto che B_k varia con k , i metodi Quasi-Newton vengono talvolta

definiti come *metodi a metrica variabile*. Questa interpretazione, tuttavia, non mette particolarmente in evidenza la caratteristica principale dei metodi considerati, che è quella di consentire l'ottenimento di una rapidità di convergenza superlineare nelle stesse ipotesi introdotte per il metodo di Newton. Ciò fa preferire attualmente la denominazione *metodi Quasi-Newton*.

7.2 Formule di rango 1

Esaminiamo ora le proprietà delle principali formule di aggiornamento proposte per il calcolo della matrice B_{k+1} a partire da B_k . La condizione Quasi-Newton espressa dalla (7.2), ossia

$$\gamma_k = (B_k + \Delta B_k) \delta_k, \quad (7.8)$$

non definisce univocamente il termine di correzione ΔB_k ; esistono quindi *infinite* possibili formule di aggiornamento. Il criterio più semplice è quello di far riferimento ad una formula del tipo:

$$\Delta B_k = \rho_k u_k v_k', \quad (7.9)$$

in cui $\rho_k \in R$ e $u_k, v_k \in R^n$. La matrice $u_k v_k'$ è una matrice $n \times n$ di rango 1 e quindi le formule basate sulla (7.9) sono denominate *formule di rango 1*. Imponendo la condizione (7.8) si ottiene:

$$\gamma_k = B_k \delta_k + \rho_k u_k v_k' \delta_k,$$

che può essere soddisfatta assumendo

$$\begin{aligned} u_k &= \gamma_k - B_k \delta_k \\ \rho_k &= 1/v_k' \delta_k, \end{aligned}$$

in cui v_k è un vettore arbitrario purchè $v_k' \delta_k \neq 0$. Si ha quindi:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\gamma_k - B_k \delta_k) v_k'}{v_k' \delta_k}, \quad (7.10)$$

In particolare, assumendo $v_k = \delta_k$ si ottiene la formula di aggiornamento

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\gamma_k - B_k \delta_k) \delta_k'}{\delta_k' \delta_k}, \quad (7.11)$$

che è nota come *formula di Broyden*. Sono state fornite diverse motivazioni concettuali della formula di Broyden. La più semplice deriva dall'osservazione che, se si impone la condizione quasi-Newton $B_{k+1} \delta_k = \gamma_k$ si intende aggiornare B_k con informazioni ottenute nella direzione determinata da δ_k e non ci sono

ragioni per far differire B_{k+1} da B_k nel complemento ortogonale di δ_k . Si verifica che, imponendo, in aggiunta alla condizione Quasi-Newton, anche la condizione

$$B_{k+1}z = B_kz, \quad \text{se } z' \delta_k = 0,$$

si ottiene la formula (7.11). Un'altra interpretazione è legata ad una giustificazione variazionale. È infatti possibile dimostrare che la matrice definita dalla (7.11) è l'unica soluzione del problema

$$\begin{aligned} \min_B \|B - B_k\|_F \\ \text{con il vincolo } \gamma_k = B\delta_k, \end{aligned}$$

in cui $\|\cdot\|_F$ indica la norma di Frobenius. La (7.11) definisce quindi la matrice che rende minima la variazione in norma di Frobenius rispetto a B_k , tra tutte le matrici B che soddisfano l'equazione Quasi-Newton.

A partire dalla (7.11) si può poi ricavare la formula inversa utilizzando il risultato seguente (noto come *formula di Sherman-Morrison-Woodbury*), la cui dimostrazione si effettua per verifica diretta.

Proposizione 7.1 *Sia A una matrice $n \times n$ non singolare e siano U e V due matrici $n \times m$ con $m \leq n$. Allora la matrice $A + UV'$ è non singolare se e solo se è non singolare la matrice $I + V'A^{-1}U$, nel qual caso risulta:*

$$(A + UV')^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(I + V'A^{-1}U)^{-1}V'A^{-1}. \quad (7.12)$$

In particolare, se $m = 1$ e $u, v \in \mathbb{R}^n$ si ha che la matrice $A + uv'$ è non singolare se e solo se $1 + v'A^{-1}u \neq 0$, nel qual caso si ha:

$$(A + uv')^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv'A^{-1}}{1 + v'A^{-1}u}. \quad \square \quad (7.13)$$

Utilizzando la (7.14) si ottiene la formula inversa:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\delta_k - H_k\gamma_k)\delta_k'H_k}{\delta_k'H_k\gamma_k}, \quad (7.14)$$

a condizione che sia $\delta_k'H_k\gamma_k \neq 0$.

Il metodo di Broyden trova applicazione essenzialmente nella soluzione di equazioni non lineari ma non è conveniente nel caso di problemi di minimizzazione. Si può notare, in particolare, che la (7.11) non assicura che B_{k+1} sia una matrice simmetrica né garantisce che la direzione $-B_k^{-1}\nabla f(x_k)$ sia una direzione di discesa. È possibile tuttavia definire una formula di rango 1 che dia luogo ad un termine

di correzione simmetrico assumendo nella (7.10) $v_k = \gamma_k - B_k \delta_k$. Si ottiene in tal modo, nell'ipotesi $(\gamma_k - B_k \delta_k)' \delta_k \neq 0$, la formula:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\gamma_k - B_k \delta_k)(\gamma_k - B_k \delta_k)'}{(\gamma_k - B_k \delta_k)' \delta_k}, \quad (7.15)$$

a cui corrisponde (nell'ipotesi che B_k e B_{k+1} siano non singolari) la formula inversa:

$$H_{k+1} = H_k + \frac{(\delta_k - H_k \gamma_k)(\delta_k - H_k \gamma_k)'}{(\delta_k - H_k \gamma_k)' \gamma_k}, \quad (7.16)$$

Si dimostra che, nel caso quadratico, se vale la condizione

$$(\delta_k - H_k \gamma_k)' \gamma_k \neq 0$$

e se i vettori $\delta_0, \delta_1, \dots$, sono linearmente indipendenti il metodo di rango 1 simmetrico definito da

$$x_{k+1} = x_k - H_k \nabla f(x_k),$$

determina in al più n iterazioni il minimo della funzione quadratica e la matrice H_n coincide con l'Hessiana inversa della funzione quadratica.

Nel caso generale, tuttavia, la formula (7.16) non assicura che la direzione di ricerca sia una direzione di discesa ed inoltre può dar luogo a fenomeni di instabilità numerica quando il denominatore è molto piccolo. Nella minimizzazione non vincolata si preferisce quindi l'uso di formule di rango 2.

7.3 Formule di rango 2

Le formule di aggiornamento di rango 2 di maggior interesse sono quelle in cui la formula inversa si può porre nella forma

$$H_{k+1} = H_k + a_k u_k u_k' + b_k v_k v_k'.$$

Imponendo la condizione Quasi-Newton:

$$H_{k+1} \gamma_k = \delta_k$$

deve risultare:

$$H_k \gamma_k + a_k u_k u_k' \gamma_k + b_k v_k v_k' \gamma_k = \delta_k. \quad (7.17)$$

Uno dei primi metodi proposti che soddisfa la (7.17) è quello noto come *metodo di Davidon-Fletcher-Powell* (DFP), in cui la (7.17) viene soddisfatta assumendo

$$u_k = \delta_k, \quad v_k = H_k \gamma_k$$

$$a_k = 1/\delta_k' \gamma_k \quad b_k = -1/\gamma_k' H_k \gamma_k.$$

In tal modo si ottiene la formula inversa DFP :

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\delta_k \delta'_k}{\delta'_k \gamma_k} - \frac{H_k \gamma_k \gamma'_k H_k}{\gamma'_k H_k \gamma_k}, \quad (7.18)$$

a cui corrisponde la formula diretta

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\gamma_k - B_k \delta_k) \gamma'_k + \gamma_k (\gamma_k - B_k \delta_k)'}{\delta'_k \gamma_k} - \frac{\delta'_k (\gamma_k - B_k \delta_k) \gamma_k \gamma'_k}{(\delta'_k \gamma_k)^2}. \quad (7.19)$$

Vale il risultato seguente.

Proposizione 7.2 Sia H_k definita positiva. Allora la matrice H_{k+1} data dalla (7.18) è definita positiva se e solo se $\delta'_k \gamma_k > 0$.

Dim. Sufficienza. Per ipotesi $z' H_k z > 0$ per ogni $z \in R^n, z \neq 0$. Dimostriamo che $z' H_{k+1} z > 0$. Poichè H_k è definita positiva è sempre possibile assumere $H_k = LL'$, in cui L è una matrice triangolare inferiore definita positiva. Assegnato $z \in R^n$ con $z \neq 0$ poniamo:

$$p = L'z \quad q = L'\gamma_k. \quad (7.20)$$

Si può allora scrivere:

$$\begin{aligned} z' H_{k+1} z &= z' H_k z + \frac{(\delta'_k z)^2}{\delta'_k \gamma_k} - \frac{z' LL' \gamma_k \gamma'_k LL' z}{\gamma'_k LL' \gamma_k} \\ &= p' p + \frac{(\delta'_k z)^2}{\delta'_k \gamma_k} - \frac{(p' q)^2}{q' q} \\ &= \frac{\|p\|^2 \|q\|^2 - (p' q)^2}{\|q\|^2} + \frac{(\delta'_k z)^2}{\delta'_k \gamma_k} \end{aligned}$$

Per la disuguaglianza di Schwarz si ha $\|p\|^2 \|q\|^2 \geq (p' q)^2$ e quindi, avendo supposto $\delta'_k \gamma_k > 0$, deve essere $z' H_{k+1} z \geq 0$. Inoltre, per $z \neq 0$, se risulta $z' H_{k+1} z = 0$ deve essere $\|p\|^2 \|q\|^2 - (p' q)^2 = 0$. In tal caso, sempre per la disuguaglianza di Schwarz, i vettori p e q devono soddisfare la condizione $p = \lambda q$ con $\lambda \in R$. Poichè L' è non singolare, ciò implica, in base alle (7.20), che sia $z = \lambda \gamma_k$, con $\lambda \neq 0$ (in quanto si è supposto $z \neq 0$). Di conseguenza si ha

$$z' H_{k+1} z = \lambda^2 \frac{(\delta'_k \gamma_k)^2}{\delta'_k \gamma_k} > 0$$

e ciò conclude la dimostrazione della sufficienza.

Necessità. Supponiamo ora che $z' H_{k+1} z > 0$ per ogni $z \in R^n$ con $z \neq 0$. Scegliamo, in particolare, $z = \gamma_k$. Poichè H_{k+1} deve soddisfare la condizione

Quasi-Newton $H_{k+1}\gamma_k = \delta_k$ si può scrivere: $0 < \gamma_k' H_{k+1} \gamma_k = \gamma_k' \delta_k$, e quindi l'asserzione è dimostrata. \square

La proposizione precedente assicura che, se H_0 è scelta definita positiva e se per ogni k vale la condizione

$$\delta_k' \gamma_k > 0, \quad (7.21)$$

tutte le matrici generate attraverso la formula DFP rimangono definite positive. Se si considera l'algoritmo

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k H_k \nabla f(x_k),$$

è possibile imporre condizioni su α_k in modo che valga la (7.21). Infatti la (7.21) equivale a richiedere:

$$d_k'(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)) > 0,$$

ossia:

$$d_k' \nabla f(x_{k+1}) > d_k' \nabla f(x_k),$$

condizione che può essere soddisfatta imponendo le condizioni di pendenza di Wolfe nella ricerca unidimensionale.

Una classe di formule di aggiornamento che comprende, come caso particolare, la formula DFP è la cosiddetta *classe di Broyden* che è definita dalla formula inversa:

$$H_{k+1} = \frac{\delta_k \delta_k'}{\delta_k' \gamma_k} - \frac{H_k \gamma_k \gamma_k' H_k}{\gamma_k' H_k \gamma_k} + \phi v_k v_k', \quad (7.22)$$

in cui $\phi \geq 0$ e

$$v_k = (\gamma_k' H_k \gamma_k)^{1/2} \left(\frac{\delta_k}{\delta_k' \gamma_k} - \frac{H_k \gamma_k}{\gamma_k' H_k \gamma_k} \right). \quad (7.23)$$

Dalla (7.21) si ottiene per $\phi = 0$ la formula DFP. Per $\phi = 1$ si ottiene una formula di aggiornamento nota come *formula di Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno* (BFGS). La formula BFGS si può porre nella forma:

$$H_{k+1} = H_k + \left(1 + \frac{\gamma_k' H_k \gamma_k}{\delta_k' \gamma_k} \right) \frac{\delta_k \delta_k'}{\delta_k' \gamma_k} - \frac{\delta_k \gamma_k' H_k + H_k \gamma_k \delta_k'}{\delta_k' \gamma_k}, \quad (7.24)$$

a cui corrisponde la formula diretta:

$$B_{k+1} = B_k + \frac{\gamma_k \gamma_k'}{\delta_k' \gamma_k} - \frac{B_k \delta_k \delta_k' B_k}{\delta_k' B_k \delta_k}. \quad (7.25)$$

Notiamo che la formula BFGS diretta ha la stessa struttura della formula DFP inversa, che si può ottenere dalla (7.25) sostituendo B_k con H_k , e scambiando δ_k con γ_k e viceversa. Notiamo anche che si può porre:

$$H_{k+1}^{(\text{BFGS})} = H_{k+1}^{(\text{DFP})} + v_k v_k', \quad (7.26)$$

in cui v_k è definito dalla (7.24), e che le matrici della classe di Broyden possono essere definite ponendo:

$$H_{k+1}^{(\text{Broyden})} = (1 - \phi)H_{k+1}^{(\text{DFP})} + \phi H_{k+1}^{(\text{BFGS})}.$$

In base alla Proposizione 7.2 tutte le formule della classe di Broyden assicurano che la matrice aggiornata rimanga definita positiva purchè sia $\delta'_k \gamma_k > 0$ e $\phi \geq 0$.

L'esperienza di calcolo sembra indicare che la formula BFGS è preferibile alle altre alternative. Come esempio di algoritmo Quasi-Newton consideriamo quindi l'algoritmo seguente.

Metodo BFGS

Passo 1. Si assume $x_0 \in R^n$ e si pone $k=0$.

Passo 2. Si calcola $\nabla f(x_k)$. Se $\nabla f(x_k) = 0$ stop; altrimenti, se $k = 0$ si assume $H_k = I$, se $k > 0$ si calcola

$$\begin{aligned}\gamma &= \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}) \\ \delta &= x_k - x_{k-1}\end{aligned}$$

e si assume;

$$H_k = H_{k-1} + \left(1 + \frac{\gamma' H_{k-1} \gamma}{\delta' \gamma}\right) \frac{\delta \delta'}{\delta' \gamma} - \frac{\delta \gamma' H_{k-1} + H_{k-1} \gamma \delta'}{\delta' \gamma}.$$

Si assume $d_k = -H_k \nabla f(x_k)$

Passo 3. Si effettua una ricerca unidimensionale lungo d_k utilizzando le condizioni di Wolfe, si assume $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, $k = k + 1$ e si ritorna al passo 2.

Nel caso di funzioni non convesse non è stato finora dimostrato che il metodo BFGS converga a punti stazionari a partire da punti iniziali e stime iniziali H_0 qualsiasi. Sotto opportune ipotesi, tuttavia, è possibile stabilire la convergenza locale e fornire stime della rapidità di convergenza. Risultati di convergenza globale sono stati ottenuti soltanto nel caso in cui la funzione obiettivo sia convessa. Nel caso generale è sempre possibile, in linea di principio assicurare la convergenza globale lungo le stesse linee seguite per modificare il metodo di Newton. In particolare, si possono costruire modifiche globalmente convergenti sia ricorrendo, quando necessario, a ricerche lungo la direzione dell'antigradiente, sia adottando tecniche tipo *trust region* con riferimento ad un'approssimazione quadratica della funzione obiettivo, in cui la matrice B_k è sostituita alla matrice Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$.