

Método de Newton modificado

Marina Andretta

ICMC-USP

27 de setembro de 2018

Baseado no livro Numerical Optimization, de J. Nocedal e S. J. Wright.

Como já vimos, o **método de Newton** com tamanhos de passo unitários converge rapidamente quando se aproxima do minimizador x^* .

No entanto, este algoritmo é inadequado para uso geral, já que ele **pode não convergir para uma solução quando o ponto inicial está longe desta**. Nestes casos, mesmo que ele convirja, seu comportamento pode ser ruim em regiões nas quais a função não é convexa.

O objetivo ao desenvolver um método prático baseado em Newton é fazê-lo **robusto e eficiente** em todos os casos.

Lembre-se que o passo de Newton p_k^N é calculado resolvendo-se o sistema linear simétrico

$$\nabla^2 f_k p_k^N = -\nabla f_k. \quad (1)$$

Para garantir convergência global, pedimos que a direção p_k^N seja de descida, o que acontece quando $\nabla^2 f_k$ é definida positiva.

Se a Hessiana $\nabla^2 f_k$ não é definida positiva ou está perto de ser singular, a direção p_k^N pode ser de subida ou pode ser excessivamente longa.

Para contornar este problema usaremos duas estratégias:

- 1 **Modificar a matriz Hessiana $\nabla^2 f_k$** antes ou durante a resolução do sistema (1) para que ela se torne suficientemente definida positiva. Este método é chamado de **método de Newton modificado**.
- 2 Resolver o sistema (1) usando um **método de gradientes conjugados** que pára quando uma direção de curvatura negativa é encontrada. Este método é chamado de **método de Newton truncado**.

Método de Newton modificado

Em muitas aplicações deseja-se usar um método direto para resolver o sistema newtoniano (1).

Se a Hessiana não é definida positiva ou está perto de ser singular, podemos modificar a matriz antes ou durante a resolução do sistema.

Assim, o passo p_k será solução de um sistema como (1), trocando a Hessiana por uma aproximação definida positiva.

A aproximação da Hessiana é obtida somando-se à Hessiana um múltiplo da matriz identidade ou uma matriz completa.

Método de Newton modificado

Método de Newton modificado com busca linear: Dados um ponto inicial x_0 e um escalar $\epsilon > 0$.

Passo 1: Faça $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Se $\|\nabla f(x_k)\| \leq \epsilon$, pare com x_k como solução.

Passo 3: Se $\nabla^2 f(x_k)$ é suficientemente definida positiva, faça $E_k \leftarrow 0$.
Senão, defina E_k de forma que $\nabla^2 f(x_k) + E_k$ seja suficientemente definida positiva.

Passo 4: Faça $B_k \leftarrow \nabla^2 f(x_k) + E_k$.

Passo 5: Fatore a matriz B_k e resolva $B_k p_k = -\nabla f(x_k)$.

Passo 6: Faça $x_{k+1} \leftarrow x_k + \alpha_k p_k$, α_k satisfaz condições de Wolfe ou é calculado usando *backtracking* com Armijo.

Passo 7: Faça $k \leftarrow k + 1$ e volte para o Passo 2.

Método de Newton modificado

É possível obter resultados de convergência bons para o Algoritmo 1, dado que a estratégia de escolha de E_k satisfaça a propriedade de **fatoração modificada limitada**.

Esta propriedade diz que a sequência de matrizes $\{B_k\}$ possuem número de condição limitado sempre que a sequência de matrizes $\{\nabla^2 f(x_k)\}$ é limitada. Ou seja

$$\text{cond}(B_k) = \|B_k\| \|B_k^{-1}\| \leq C, \quad C > 0, \quad \forall k. \quad (2)$$

Teorema 3: *Seja f com derivadas segundas contínuas em um conjunto aberto \mathcal{D} . Suponha que o ponto inicial do Algoritmo 1 seja tal que o conjunto de nível $L = \{x \in \mathcal{D} \mid f(x) \leq f(x_0)\}$ é compacto.*

Então, se a propriedade de fatoração modificada limitada vale, temos que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f(x_k) = 0.$$

Método de Newton modificado

Consideremos agora a **ordem de convergência do método de Newton modificado com busca linear**. Suponha que a sequência de iterandos x_k converge a um ponto x^* no qual a Hessiana é suficientemente definida positiva (ou seja, $E_k = 0$ para todo k suficientemente grande). Neste caso, temos que $\alpha_k = 1$ para todo k suficientemente grande e o **método de reduz ao método de Newton puro**. Isso garante **convergência quadrática**.

Para **problemas em que $\nabla^2 f(x^*)$ está perto de ser singular**, não há garantia de que E_k se anulará. Neste caso, **convergência pode ser apenas linear**.

Veremos agora **algoritmos** para garantir que a matriz B_k seja **suficientemente definida positiva**. Além disso, B_k deve ser **bem-condicionada** e desejamos **somar o mínimo possível** à Hessiana para que a informação de segunda ordem seja mantida ao máximo.

Começaremos com uma estratégia ideal, baseada na decomposição em autovalores de $\nabla^2 f(x_k)$

Considere um problema para o qual, na iteração k , temos $\nabla f(x_k) = (1, -3, 2)^T$ e $\nabla^2 f(x_k) = \text{diag}(10, 3, -1)$, que é indefinida.

Pelo **teorema da decomposição espectral**, podemos definir $Q = I$ e $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ e escrever

$$\nabla^2 f(x_k) = Q \Lambda Q^T = \sum_{i=1}^n \lambda_i q_i q_i^T. \quad (3)$$

Modificação do autovalor

O passo de Newton (solução de (1)) é $p_k^N = (-0.1, 1, 2)^T$, que não é uma direção de descida, já que $\nabla f(x_k)^T p_k^N = 0.9 > 0$.

Uma ideia para substituir a matriz $\nabla^2 f(x_k)$ do sistema newtoniano por uma matriz B_k definida positiva seria **trocar todos os autovalores negativos da matriz Hessiana por um número positivo pequeno δ** que seja maior do que a precisão u da máquina, digamos $\delta = \sqrt{u}$.

Supondo que a precisão da máquina seja 10^{-16} , a matriz resultante neste exemplo seria

$$B_k = \sum_{i=1}^2 \lambda_i q_i q_i^T + \delta q_3 q_3^T = \text{diag}(10, 3, 10^{-8}). \quad (4)$$

Esta matriz B_k é numericamente definida positiva e tem a curvatura nas direções dos autovetores q_1 e q_2 preservada.

No entanto, a direção de busca baseada na Hessiana modificada seria

$$p_k = - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\lambda_i} q_i (q_i^T \nabla f_k) - \frac{1}{\delta} q_3 (q_3^T \nabla f_k) \approx -(2 \times 10^8) q_3. \quad (5)$$

Para valores pequenos de δ , esta direção é quase paralela a q_3 (com pouca contribuição de q_1 e q_2) e muito longa.

Apesar de f decrescer ao longo da direção p_k , seu tamanho viola o espírito do método de Newton, que é baseado na aproximação quadrática da função objetivo que é válida numa vizinhança do ponto atual x_k .

Existem muitas estratégias que podem ser consideradas:

- Trocar os sinais dos autovalores negativos em (3), que seria o mesmo que considerar $\delta = 1$ neste exemplo.
- Definir o último termo de (5) como nulo, para que a direção de curvatura negativa não seja considerada.
- Adaptar a escolha de δ para garantir que o tamanho do passo não seja muito grande.
- Etc.

Apesar do grande número de estratégias possíveis, não há uma que seja considerada ideal.

Modificação do autovalor

A modificação feita em (4) para a matriz do exemplo pode ser considerada ótima no seguinte sentido: se A é uma matriz simétrica com decomposição espectral $A = Q\Lambda Q^T$, então a **matriz de correção ΔA de norma de Frobenius mínima** que garante que $\lambda_{\min}(A + \Delta A) \geq \delta$ é dada por

$$\Delta A = Q \text{diag}(\tau_i) Q^T, \quad \text{com } \tau_i = \begin{cases} 0, & \lambda_i \geq \delta, \\ \delta - \lambda_i, & \lambda_i < \delta. \end{cases} \quad (6)$$

Note que a matriz ΔA não é diagonal no caso geral.

A matriz modificada, neste caso, passa a ser

$$A + \Delta A = A + Q \text{diag}(\tau_i) Q^T.$$

Modificação do autovalor

Usando outra norma para o cálculo de ΔA , podemos obter uma matriz diagonal.

Suponha novamente que A seja uma matriz simétrica com decomposição espectral $A = Q\Lambda Q^T$. A **matriz de correção ΔA com norma euclidiana mínima** que satisfaz $\lambda_{\min}(A + \Delta A) \geq \delta$ é dada por

$$\Delta A = \tau I, \quad \text{com } \tau = \max\{0, \delta - \lambda_{\min}(A)\}. \quad (7)$$

Modificação do autovalor

Neste caso, a matriz modificada tem a forma

$$A + \tau I.$$

Portanto, todos os autovalores de A são deslocados e todos são maiores do que δ .

Estes resultados mostram que **tanto modificações diagonais como não diagonais podem ser consideradas**. Apesar de não se saber que estratégia produz melhores resultados, vários métodos para modificar a Hessiana já foram propostos e implementados, produzindo bons resultados.

Soma de um múltiplo da identidade

Talvez a ideia mais simples seja encontrar um escalar $\tau > 0$ tal que $\nabla^2 f(x_k) + \tau I$ seja suficientemente definida positiva.

Sabemos que τ deve satisfazer (7), mas geralmente não temos uma boa estimativa do menor autovalor da Hessiana.

Uma ideia é usar o fato que o maior autovalor da matriz A , em valor absoluto, é limitado pela norma de Frobenius $\|A\|_F$. Isso sugere a seguinte estratégia:

Soma de um múltiplo da identidade

Cholesky com múltiplo da identidade somado: Dada uma matriz A .

Passo 1: Faça $\beta \leftarrow \|A\|_F$, $k \leftarrow 0$.

Passo 2: Se $\min a_{ii} > 0$, então

faça $\tau_0 \leftarrow 0$.

Senão

faça $\tau_0 \leftarrow \beta/2$.

Passo 3: Tente aplicar a fatoração de Cholesky incompleta para obter $GG^T = A + \tau_k I$.

Se a fatoração foi feita com sucesso, pare com G .

Senão, faça $\tau_{k+1} \leftarrow \max(2\tau_k, \beta/2)$, $k \leftarrow k + 1$ e volte para o Passo 3.

Soma de um múltiplo da identidade

Esta estratégia é simples e pode ser preferível à fatoração de Cholesky modificada. No entanto, ela possui **dois inconvenientes**.

- 1 O valor de τ gerado pelo algoritmo pode ser desnecessariamente grande, o que prejudicaria a direção de Newton modificada, tornando-a muito próxima à direção de máxima descida.
- 2 Para todo valor de τ_k , é necessário recalcular a fatoração $A + \tau_k I$. Isto pode ser custoso quando vários valores de τ_k são gerados.

Fatoração de Cholesky modificada

Uma estratégia popular usada para modificar a matriz Hessiana que não é definida positiva é **realizar a fatoração de Cholesky e aumentar os elementos da diagonal durante a fatoração** (quando necessário) para garantir que eles sejam suficientemente positivos.

Esta estratégia de **fatoração de Cholesky modificada** foi desenvolvida para satisfazer dois objetivos:

- 1 Garantir que os fatores de Cholesky modificados existam e que são limitados pela norma da Hessiana verdadeira.
- 2 Não mudar a Hessiana quando esta é suficientemente definida positiva.

Fatoração de Cholesky modificada

Primeiramente, vejamos como é feita a fatoração de Cholesky.

Toda matriz simétrica definida positiva pode ser escrita como

$$A = LDL^T,$$

com L matriz triangular inferior com diagonal unitária e D matriz diagonal com elementos positivos na diagonal.

Fatoração de Cholesky na forma LDL^T : Dada uma matriz A .

Passo 1: Para $j = 1, 2, \dots, n$,

$$\text{faça } c_{jj} \leftarrow a_{jj} - \sum_{s=1}^{j-1} d_s l_{js}^2,$$

$$\text{Faça } d_j \leftarrow c_{jj}.$$

Para $i = j + 1, \dots, n$,

$$\text{faça } c_{ij} \leftarrow a_{ij} - \sum_{s=1}^{j-1} d_s l_{is} l_{js},$$

$$\text{faça } l_{ij} \leftarrow c_{ij} / d_j.$$

Fatoração de Cholesky modificada

Pode-se mostrar que os elementos da diagonal d_j são todos positivos quando A é definida positiva.

O algoritmo apresentado difere um pouco dos algoritmos de fatoração de Cholesky tradicionais, que calculam a fatoração $A = GG^T$, com G triangular inferior. De fato, $G = LD^{1/2}$.

Se A é indefinida, a fatoração $A = LDL^T$ pode não existir. Mesmo que exista, o algoritmo apresentado é numericamente instável quando aplicado a estas matrizes, pois os elementos de D e L podem se tornar arbitrariamente grandes.

Assim, a estratégia de calcular a fatoração LDL^T e depois modificar a diagonal para que seus elementos sejam positivos pode não funcionar ou a matriz resultante LDL^T pode ser muito diferente de A .

Fatoração de Cholesky modificada

Em vez disso, a matriz A será modificada durante a fatoração, de modo que todos os elementos de D sejam suficientemente positivos e, então, os elementos de L e D não sejam muito grandes.

Para controlar a qualidade da modificação, são usados dois parâmetros positivos δ e β . Durante o cálculo da j -ésima coluna de L e D , pede-se que

$$d_j \geq \delta, \quad |g_{ij}| \leq \beta, \quad i = j + 1, \dots, n. \quad (8)$$

Fatoração de Cholesky modificada

Para satisfazer estes limitantes, precisamos modificar apenas um passo do algoritmo de fatoração de Cholesky: a fórmula para calcular a diagonal d_j é substituída por

$$d_j = \max \left\{ |c_{jj}|, \left(\frac{\theta_j}{\beta} \right)^2, \delta \right\}, \quad \text{com } \theta_j = \max_{j < i \leq n} |c_{ij}|.$$

Note que os limitantes (8) valem, já que $c_{ij} = l_{ij}d_j$ e, portanto,

$$|g_{ij}| = |l_{ij}\sqrt{d_j}| = \frac{|c_{ij}|}{\sqrt{d_j}} \leq \frac{|c_{ij}|\beta}{\theta_j} \leq \beta, \quad \forall i > j.$$

Fatoração de Cholesky modificada

Note que θ_j pode ser calculado antes de d_j , pois os elementos c_{ij} do segundo laço do algoritmo de fatoração de Cholesky não envolvem d_j .

Este fato sugere que os cálculos sejam agrupados de modo que c_{ij} seja computado antes dos elementos diagonais d_j .

Para tentar diminuir o tamanho das modificações, permutações simétricas de linhas e colunas são feitas, para que no j -ésimo passo da fatoração, a linha e coluna j são aquelas que possuem o maior elemento da diagonal.

Fatoração de Cholesky modificada

Fatoração de Cholesky modificada: Dados $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, $\delta > 0$, $\beta > 0$.

Passo 1: Para $j = 1, 2, \dots, n$, faça $c_{jj} \leftarrow a_{jj}$.

Passo 2: Para $j = 1, 2, \dots, n$,

encontre o índice q tal que $|c_{qq}| \geq |c_{ii}|$, $i = j, \dots, n$.

Permute as linhas e colunas j e q .

Para $s = 1, \dots, j - 1$, faça $l_{js} \leftarrow c_{js}/d_s$.

Para $i = j + 1, \dots, n$, faça $c_{ij} \leftarrow a_{ij} - \sum_{s=1}^{j-1} l_{js}c_{is}$.

Faça $\theta_j \leftarrow 0$.

Se $j \leq n$, então $\theta_j \leftarrow \max_{j < i \leq n} |c_{ij}|$.

Faça $d_j \leftarrow \max\{|c_{jj}|, (\theta_j/\beta)^2, \delta\}$.

Se $j < n$ então

para $i = j + 1, \dots, n$, faça $c_{ii} \leftarrow c_{ii} - c_{ij}^2/d_j$

Fatoração de Cholesky modificada

O algoritmo para **fatoração de Cholesky modificada** requer, aproximadamente, $n^3/6$ **operações aritméticas**, que é **quase o mesmo que a fatoração de Cholesky tradicional**.

No entanto, as permutações de linhas e colunas fazem com que dados devam ser movimentados no computador, o que pode representar altos custos em problemas de grande porte.

Não é necessário armazenamento além do necessário para A , já que o fator triangular L , a matriz diagonal D e os valores intermediários c_{ij} **podem sobrescrever os elementos de A** .

Fatoração de Cholesky modificada

Vamos denotar por P a matriz de permutações associada com as permutações de linhas e colunas feitas no Passo 2 do algoritmo de **fatoração de Cholesky modificada**. Não é difícil notar que o algoritmo produz a fatoração de Cholesky de uma matriz $PAP^T + E$, ou seja,

$$PAP^T + E = LDL^T = GG^T,$$

onde E é uma matriz diagonal não-negativa que é nula se A é suficientemente definida positiva.

Fatoração de Cholesky modificada

Examinando as fórmulas de c_{jj} e d_j , fica claro que os elementos da diagonal de E são $e_j = d_j - c_{jj}$.

Também fica claro que somar e_j a c_{jj} na fatoração é equivalente a somar e_j a a_{jj} da matriz original.

Fica faltando apenas especificar a escolha dos parâmetros δ e β .

Fatoração de Cholesky modificada

A constante δ é geralmente escolhida perto da precisão da máquina u .
Uma escolha típica é

$$\delta = u \max\{\gamma(A) + \xi(A), 1\},$$

com $\gamma(A)$ elemento da diagonal de maior magnitude e $\xi(A)$ elemento fora da diagonal de maior magnitude. Ou seja,

$$\gamma(A) = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|, \quad \xi(A) = \max_{i \neq j} |a_{ij}|.$$

Fatoração de Cholesky modificada

Uma sugestão para a escolha de β é

$$\beta = \max \left\{ \gamma(A), \frac{\xi(A)}{\sqrt{n^2-1}}, u \right\}^{1/2},$$

que tenta minimizar a norma das modificações $\|E\|_\infty$.

É possível mostrar que a **matriz B_k** obtida pela aplicação da **fatoração de Cholesky modificada à Hessiana $\nabla^2 f(x_k)$** tem **número de condição limitado**, ou seja, o limitante (2) vale para algum valor de C .