

Algebre di matrici secanti nei metodi di minimizzazione LQN

Carmine Di Fiore

Dipartimento di Matematica, Università di Roma "Tor Vergata"

difiore@mat.uniroma2.it

Padova, 26-27 Febbraio 2007

- 1 I metodi di minimizzazione LQN ed il criterio secante per la scelta dell'algebra L
- 2 Una famiglia di algebre L di matrici secanti

I metodi di minimizzazione LQN ed il criterio secante per la scelta dell'algebra \mathcal{L}

- Sia U una matrice $n \times n$ unitaria ed \mathcal{L} l'insieme delle matrici diagonalizzate da U

$$\mathcal{L} = sd U = \{UDU^* : D \text{ diag}\}, \quad U = (U^*)^{-1}$$

Supponiamo che \mathcal{L} abbia una base reale.

Allora: $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definita positiva (dp) $\Rightarrow \mathcal{L}_B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ dp

$$\|\mathcal{L}_B - B\|_F = \min_{X \in \mathcal{L}} \|X - B\|_F$$

- Dati $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{s}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, sia $\varphi(X, \mathbf{s}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matrice

$$\varphi(X, \mathbf{s}, \mathbf{y}) = X + \frac{1}{\mathbf{y}^T \mathbf{s}} \mathbf{y} \mathbf{y}^T - \frac{1}{\mathbf{s}^T X \mathbf{s}} X \mathbf{s} \mathbf{s}^T X$$

Allora: X dp & $\mathbf{s}^T \mathbf{y} > 0 \Rightarrow \varphi(X, \mathbf{s}, \mathbf{y})$ dp

Inoltre: $\varphi(X, \mathbf{s}, \mathbf{y}) \mathbf{s} = \mathbf{y}$

Usando \mathcal{L} e φ si definisce il seguente metodo LQN per il calcolo di un punto di minimo \mathbf{x}_* per $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$\mathbf{x}_*, \quad f(\mathbf{x}_*) = \min_{\mathbf{x} \in D} f(\mathbf{x}), \quad D \subset \mathbb{R}^n$$

Metodo LQN

$$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n, \quad B_0 = I, \quad \mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$$

For $k = 0, 1, \dots$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k \quad \lambda_k \mid f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k) \ \& \ \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0 \\ B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \underbrace{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}_{\mathbf{s}_k}, \underbrace{\mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k}_{\mathbf{y}_k}) \\ \mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1} \quad \leftarrow \text{direz di decrescita} \end{array} \right.$$

$f \in C^1$, limitata inferiormente $\Rightarrow \{\mathbf{x}_k\}$ ben definita

$$\mathbf{g}_k = \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

LQN vs BFGS= metodo di minimizz. con convergenza superlineare

$$\text{BFGS } B_{k+1} = \varphi(B_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k) \rightarrow \text{LQN } B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k)$$

- Costo per passo: $O(n^2)$ \rightarrow costo di $U \cdot \mathbf{z}$ ($U^* \cdot \mathbf{z}$)
- Memoria: $O(n^2)$ \rightarrow $O(n)$

Risultato: U trasformate veloci

($U = \text{Fourier, Hartley, } \dots, \text{Householder}$)

\Rightarrow con LQN diventano trattabili i problemi di grandi dimensioni

- Entrambi sono metodi *secanti*, infatti, **per entrambi** si ha

$$\mathbf{x}_{k+2} = \mathbf{x}_{k+1} - \lambda_{k+1} B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1},$$

$$B_{k+1}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k \quad (\text{equazione secante})$$

- La matrice \square utilizzata nella definizione di B_{k+1} ,

$$B_{k+1} = \varphi(\square, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k),$$

soddisfa l'equ. secante del passo precedente solo in BFGS:

$$\text{BFGS } B_{k+1} = \varphi(B_k, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k), \quad B_k \mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{y}_{k-1}$$

$$\text{LQN } B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k), \quad \mathcal{L}_{B_k} \mathbf{s}_{k-1} \neq \mathbf{y}_{k-1}$$

\Rightarrow con LQN la matrice \square non ha più la struttura secante che aveva con BFGS

Per migliorare LQN dare una struttura secante a \mathcal{L}_{B_k} :
richiedere che la matrice di \mathcal{L} che soddisfa l'equazione
 $X \mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{y}_{k-1}$, cioè'

$$\mathcal{L}_{\mathbf{s}\mathbf{y}} = U \text{diag} \left(\frac{(U^* \mathbf{y}_{k-1})_i}{(U^* \mathbf{s}_{k-1})_i} \right) U^*,$$

sia dp ($\Rightarrow \mathcal{L}_{B_k}$ "più vicina" a $\mathcal{L}_{\mathbf{s}\mathbf{y}}$), ovvero richiedere:

$$U = (U^*)^{-1} : \frac{(U^* \mathbf{y}_{k-1})_i}{(U^* \mathbf{s}_{k-1})_i} > 0, \quad \forall i$$

→ Il metodo \mathcal{LQN} diventa adattivo

→ Il metodo LQN diventa adattivo

$$\begin{aligned} & \dots \dots \lambda_k \mid \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0 \\ & B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k) \\ & \text{if } \mathcal{L}_{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k} \text{ is pd then} \{ \\ & \quad \mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1} \\ & \} \end{aligned}$$

→ Il metodo \mathcal{LQN} diventa adattivo

$$\dots \dots \lambda_k \mid \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0$$

$$B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k)$$

if $\mathcal{L}_{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k}$ is pd then {

$$\mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$$

} else {

$$\mathbf{d}_{k+1} = -(\mathcal{L}_{B_{k+1}})^{-1} \mathbf{g}_{k+1} \quad \leftarrow \text{temporary descent direction}$$

→ Il metodo $\mathcal{L}QN$ diventa adattivo

$$\dots \dots \lambda_k \mid \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0$$

$$B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k)$$

if $\mathcal{L}_{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k}$ is pd then {

$$\mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$$

} else {

$$\mathbf{d}_{k+1} = -(\mathcal{L}_{B_{k+1}})^{-1} \mathbf{g}_{k+1} \quad \leftarrow \text{temporary descent direction}$$

define a fast transform U s.t. $(U^* \mathbf{y}_k)_i / (U^* \mathbf{s}_k)_i > 0$

(nota: nella nostra ip. su λ_k tale U esiste)

→ Il metodo $\mathcal{L}QN$ diventa adattivo

... .. $\lambda_k \mid \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0$
 $B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k)$
if $\mathcal{L}_{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k}$ is pd then {
 $\mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$
} else {
 $\mathbf{d}_{k+1} = -(\mathcal{L}_{B_{k+1}})^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$ ← temporary descent direction
 define a fast transform U s.t. $(U^* \mathbf{y}_k)_i / (U^* \mathbf{s}_k)_i > 0$
 (nota: nella nostra ip. su λ_k tale U esiste)
 set $\mathcal{L} = sd U$
}

→ Il metodo LQN diventa adattivo

... .. $\lambda_k \mid \mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k > 0$
 $B_{k+1} = \varphi(\mathcal{L}_{B_k}, \mathbf{s}_k, \mathbf{y}_k)$
if $\mathcal{L}_{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k}$ is pd then {
 $\mathbf{d}_{k+1} = -B_{k+1}^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$
} else {
 $\mathbf{d}_{k+1} = -(\mathcal{L}_{B_{k+1}})^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$ ← temporary descent direction
 define a fast transform U s.t. $(U^* \mathbf{y}_k)_i / (U^* \mathbf{s}_k)_i > 0$
 (nota: nella nostra ip. su λ_k tale U esiste)
 set $\mathcal{L} = sd U$
}

In LQN adattivo l'algebra \mathcal{L} utilizzata nella definizione di B_{k+1} contiene sempre (per ogni k) una matrice definita positiva che risolve l'equazione $X \mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{y}_{k-1}$

Rate of convergence of *adaptive LQN*

Experiments : fast rate of convergence, competitive with *LQN*

- The Ionosphere data set ($n = 1408$)

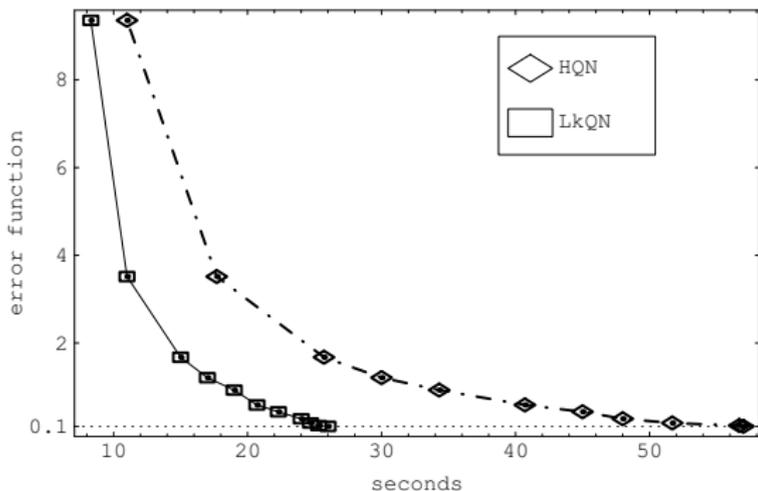


Figure: *LQN* and *adaptive LQN* applied to a function of 1408 variables

- The Iris plant data set ($n = 315$)

Number of iterations to obtain $f(\mathbf{x}_k) < 0.1$

f	\mathbf{x}_0^1	\mathbf{x}_0^2	\mathbf{x}_0^3	\mathbf{x}_0^4
\mathcal{LQN}	10930	13108	3854	7663
<i>adaptive</i> \mathcal{LQN}	3430	1663	3647	1525

Number of iterations to obtain $f(\mathbf{x}_k) < 0.01$

f	\mathbf{x}_0^1	\mathbf{x}_0^2	\mathbf{x}_0^3	\mathbf{x}_0^4
\mathcal{LQN}	24085	42344	6184	33250
<i>adaptive</i> \mathcal{LQN}	19961	2886	8306	3111

\Rightarrow Dare una struttura secante a \mathcal{L}_{B_k} , migliora l'efficienza dei metodi di minimizzazione LQN

\mathcal{L} deve essere tale che, ad i vettori \mathbf{s}_{k-1} , \mathbf{y}_{k-1} , $\mathbf{s}_{k-1}^T \mathbf{y}_{k-1} > 0$ generati da LQN corrisponda una matrice $\mathcal{L}_{\mathbf{sy}} \in \mathcal{L}$ definita positiva, tale che $\mathcal{L}_{\mathbf{sy}} \mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{y}_{k-1}$

ovvero, per $\mathcal{L} = sdU$, U si deve avere $(U^* \mathbf{y})_i / (U^* \mathbf{s})_i > 0, \forall i$

\rightarrow È importante studiare algebre \mathcal{L} di matrici secanti

Definizione Dati $\mathbf{s}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{s}^T \mathbf{y} > 0$,

$\mathcal{L} =$ algebra di matrici secante

se \mathcal{L} contiene una matrice $\mathcal{L}_{\mathbf{sy}}$ dp tale che $\mathcal{L}_{\mathbf{sy}} \mathbf{s} = \mathbf{y}$

Una famiglia di algebre L di matrici secanti

input: coppia di vettori \mathbf{s} , \mathbf{y} con prodotto scalare positivo:

$$\mathbf{s}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \quad 0 < \cos \mathbf{s}\mathbf{y} = \frac{\mathbf{s}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{s}\| \|\mathbf{y}\|} \leq 1$$

output: famiglia di trasformazioni unitarie $U = U_{\mathbf{s}, \mathbf{y}, t}$, $t \in \mathcal{T}$ per cui $\mathcal{L}_{\mathbf{s}\mathbf{y}} = U \text{diag}((U^* \mathbf{y})_i / (U^* \mathbf{s})_i) U^*$ sia definita positiva:

$$U = U_{\mathbf{s}, \mathbf{y}, t} = (U^*)^{-1}, \quad (U^* \mathbf{y})_i / (U^* \mathbf{s})_i > 0 \quad \forall t \in \mathcal{T} \subset \mathbb{R}.$$

ovvero, *algebre di matrici secanti* $\mathcal{L}_{\mathbf{s}, \mathbf{y}, t} = sd U_{\mathbf{s}, \mathbf{y}, t}$, $t \in \mathcal{T}$, che possono, quindi, in principio, essere utilizzate per migliorare le proprietà di convergenza dei metodi di minimizzazione LQN.

Sia \mathbf{b}_t il seguente vettore di norma 1, nel piano per \mathbf{s} e \mathbf{y} :

$$\mathbf{b}_t = \frac{1}{\sqrt{w}} \left(t \frac{\mathbf{s}}{\|\mathbf{s}\|} + (1-t) \frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|} \right), \quad t \in (0,1)$$

dove $w = \left\| t \frac{\mathbf{s}}{\|\mathbf{s}\|} + (1-t) \frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|} \right\|^2$ è funzione di t e di $\cos \mathbf{s}\mathbf{y}$.

Si introduce $U = U_{\mathbf{s},\mathbf{y},t} = (U^*)^{-1}$ tale che, $\forall t \in \mathcal{T} \subset (0,1)$,

$$U^* : \mathbf{b}_t \rightarrow \mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$U^* \mathbf{s} > \mathbf{0}$$

$$U^* \mathbf{y} > \mathbf{0}$$

U^* = prodotto di due matrici di Householder

Matrici unitarie di Householder:

$$H(\mathbf{z}) = I - \frac{2}{\|\mathbf{z}\|^2} \mathbf{z} \mathbf{z}^*, \quad \mathbf{z} \in \mathbb{C}^n$$

Oss. $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ tali che $\begin{cases} \mathbf{v}^* \mathbf{u} = \mathbf{u}^* \mathbf{v} \\ \|\mathbf{u}\|^2 = \|\mathbf{v}\|^2 \end{cases} \Rightarrow H(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \mathbf{u} = \mathbf{v}$

Lemma: $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, $\|\mathbf{u}\|^2 = \|\mathbf{v}\|^2 \Rightarrow H(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \mathbf{u} = \mathbf{v}$

Nota: $H(\mathbf{z})$ è hermitiana. Quindi, si ha anche $H(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \mathbf{v} = \mathbf{u}$

Dal Lemma segue che

$$\mathbf{u} = \mathbf{e} - \mathbf{b}_t \Rightarrow H(\mathbf{u}) \mathbf{b}_t = \mathbf{e}$$

Risultato 1: $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{p}^* \mathbf{e} = 0 \Rightarrow H(\mathbf{p}) H(\mathbf{u}) \mathbf{b}_t = \mathbf{e}$

Risultato 2:

$$\mathbf{p} = H(\mathbf{u})\mathbf{s} - \begin{bmatrix} \sqrt{1-\rho} \\ \sqrt{\frac{\rho}{n-1}} \\ \vdots \end{bmatrix} \|\mathbf{s}\|, \quad \text{con } \rho \text{ tale che } \mathbf{p}^* \mathbf{e} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} H(\mathbf{p})H(\mathbf{u})\mathbf{b}_t = \mathbf{e} \\ H(\mathbf{p})H(\mathbf{u})\mathbf{s} = \begin{bmatrix} \sqrt{1-\rho} \\ \sqrt{\frac{\rho}{n-1}} \\ \vdots \end{bmatrix} \|\mathbf{s}\| \quad (\text{vedi Lemma}) \\ H(\mathbf{p})H(\mathbf{u})\mathbf{y} = \frac{1}{1-t} \left(\sqrt{w}\mathbf{e} - t \begin{bmatrix} \sqrt{1-\rho} \\ \sqrt{\frac{\rho}{n-1}} \\ \vdots \end{bmatrix} \right) \|\mathbf{y}\| \end{cases}$$

Problema:

Dato $t \in (0, 1)$ esiste $\rho \in (0, 1) \cup (1 - \frac{w}{nt^2}, w \frac{n-1}{nt^2})$ tale che $\mathbf{p}^* \mathbf{e} = 0$?

In caso affermativo si avrebbe $H(\mathbf{p})H(\mathbf{u})\mathbf{s} > \mathbf{0}$ e $H(\mathbf{p})H(\mathbf{u})\mathbf{y} > \mathbf{0}$.

Per $\rho = 1 - \frac{\sigma w}{2nt^2}$ si ottiene il

Problema equivalente: Siano

$$f(\sigma) = -\sqrt{2}\left(1 + \frac{2t-1}{w}\right)\sqrt{\sigma} + \sigma, \quad g = 2t^2 \frac{n-1}{w} - \frac{n}{2}\left(1 + \frac{2t-1}{w}\right)^2$$

Dato $t \in (0, 1)$ esiste $\sigma \in (0, \frac{2nt^2}{w}) \cap (\frac{2nt^2}{w} - 2n + 2, 2)$
tale che $f(\sigma) = g$?

Dim: $\mathbf{p}^* \mathbf{e} = \{\cdot\} \|\mathbf{s}\|$ con $\{\cdot\} = 0$ se e solo se $f(\sigma) = g$. \square

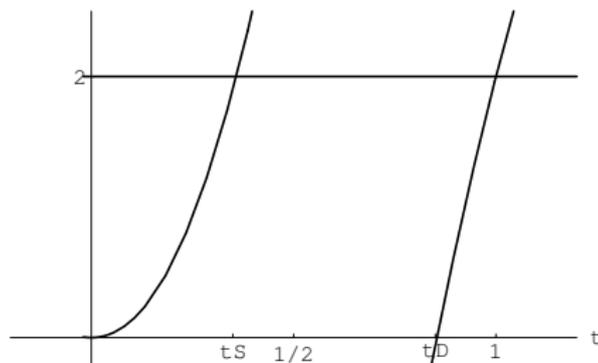
Tre sottoproblemi:

- 1) Dato $t \in (0, t_S)$ esiste $\sigma \in (0, \frac{2nt^2}{w})$ tale che $f(\sigma) = g$?
- 2) Dato $t \in [t_S, t_D]$ esiste $\sigma \in (0, 2)$ tale che $f(\sigma) = g$?
- 3) Dato $t \in (t_D, 1)$ esiste $\sigma \in (\frac{2nt^2}{w} - 2n + 2, 2)$ tale che $f(\sigma) = g$?

dove t_S e t_D sono numeri dipendenti da n e $\cos \mathbf{sy}$, tali che

$$0 < t_S < \frac{1}{2} < t_D < 1$$

sigma, n=6, cos=0.5



Risoluzione del sottoproblema 2):

Dato $t \in [t_S, t_D]$ esiste $\sigma \in (0, 2)$ tale che $f(\sigma) = g$?

$t = 1/2$: ci si chiede se esiste $\sigma \in (0, 2)$ tale che

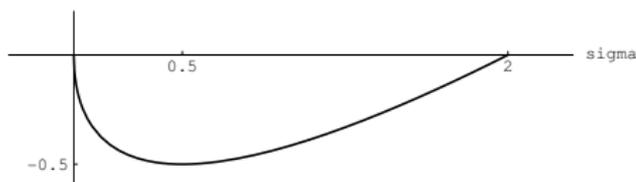
$$f(\sigma) = -\sqrt{2}\sqrt{\sigma} + \sigma = \frac{n-1}{1 + \cos \mathbf{sy}} - \frac{n}{2} = g.$$

grafico di $f(\sigma)$, $\sigma \in (0, 2)$, \Rightarrow esiste se e solo se

$$-\frac{1}{2} \leq \frac{n-1}{1 + \cos \mathbf{sy}} - \frac{n}{2} < 0 \text{ se e solo se } \begin{cases} 1 + \cos \mathbf{sy} \leq 2 \\ \cos \mathbf{sy} > 1 - \frac{2}{n} \end{cases}$$

se e solo se \mathbf{s} e \mathbf{y} quasi paralleli

f(sigma), t=1/2



t generico: confrontare $f(\sigma)$, $\sigma \in (0, 2)$, con g

Risultati:

$\forall t \in (0, 1)$: $f(0) = 0$, f è strettamente convessa,

$g \geq f_{min} = f(\sigma_{min}) = \min_{\sigma \in (0, 2)} f(\sigma) = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{2t-1}{w}\right)^2$ con

$\sigma_{min} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2t-1}{w}\right)^2$

Nota: $g = f_{min}$ per $\cos \mathbf{sy} = 1$

$f(2)$ è > 0 , $= 0$ o < 0 a seconda che $t \in (0, 1/2)$, $t = 1/2$ o $t \in (1/2, 1)$

Nota: se $t \in (0, 1/2)$ si ha $f(2(1 + \frac{2t-1}{w})^2) = 0$.

$t \in (\max\{0, t_-\}, 1) \Rightarrow g < 0$ ($g = 0$ per $t = t_-$)

$t \in (0, \min\{1, t_+\}) \Rightarrow g < f(2)$ ($g = f(2)$ per $t = t_+$)

dove t_- , t_+ sono numeri dipendenti da n e $\cos \mathbf{sy}$, tali che

$$-\infty \leq t_- < t_D, \quad t_S < t_+ \leq +\infty$$

con $t_- = t_D$, $t_+ = t_S$ per $\mathbf{s}^T \mathbf{y} = 0$ e $t_{\mp} = \mp \infty$ per $\cos \mathbf{sy} = 1$.

Applicazione:

Sia $t \in [t_5, \min\{\frac{1}{2}, t_+\})$.

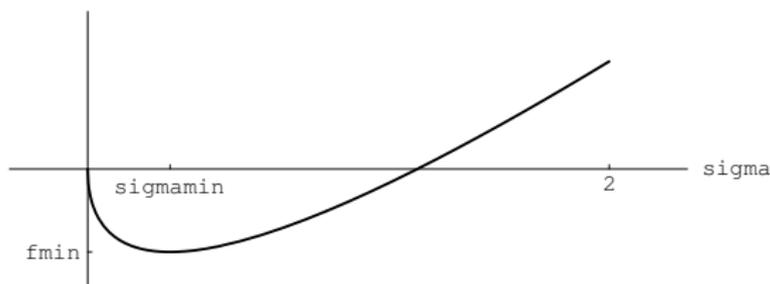
$\Rightarrow t < 1/2 \Rightarrow f(2) > 0 \Rightarrow f(\sigma)$ ha il grafico in figura.

Inoltre, si ha $t < t_+ \Rightarrow$

$$f_{min} \leq g < f(2)$$

$\Rightarrow \exists \sigma \in (0, 2)$ tale che $f(\sigma) = g$.

$f(\sigma), t < 1/2$



Applicazione:

Sia $t \in (\max\{\frac{1}{2}, t_-\}, t_D]$.

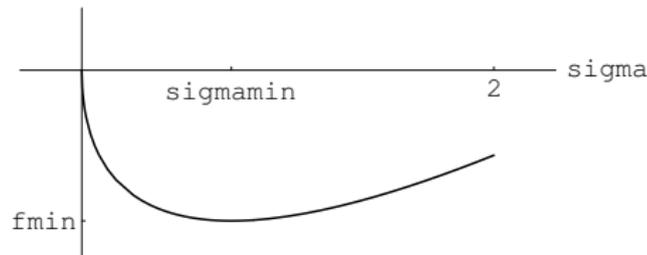
$\Rightarrow t > 1/2 \Rightarrow f(2) < 0 \Rightarrow f(\sigma)$ ha il grafico in figura.

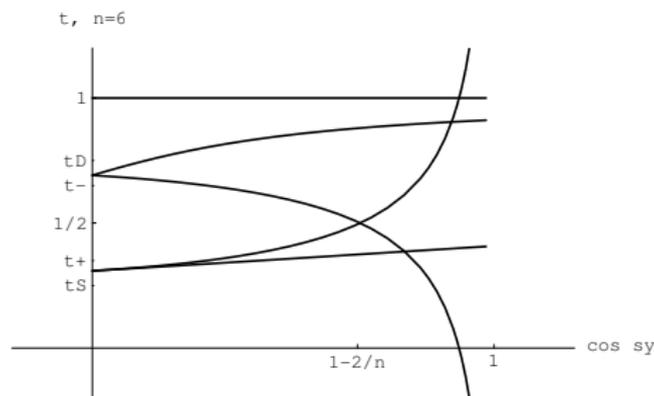
Inoltre, si ha $t > t_- \Rightarrow$

$$f_{min} \leq g < 0$$

$\Rightarrow \exists \sigma \in (0, 2)$ tale che $f(\sigma) = g$.

$f(\sigma), t > 1/2$





$$\mathcal{T} = [t_S, t_+) \cup (t_-, t_D] \text{ se } 0 < \cos \mathbf{s} \mathbf{y} \leq 1 - \frac{2}{n}$$

$$\mathcal{T} = [t_S, t_D] \text{ se } 1 - \frac{2}{n} < \cos \mathbf{s} \mathbf{y} \leq 1$$

$\forall t \in \mathcal{T}$ esiste σ t.c. $f(\sigma) = g$ e, quindi, sono ben definiti
 $\mathbf{u}_t, \mathbf{p}_t \in \mathbb{R}^n$ per cui $H(\mathbf{p}_t)H(\mathbf{u}_t)\mathbf{s} > \mathbf{0}$ e $H(\mathbf{p}_t)H(\mathbf{u}_t)\mathbf{y} > \mathbf{0}$

$$\Rightarrow U^* = H(\mathbf{p}_t)H(\mathbf{u}_t)$$